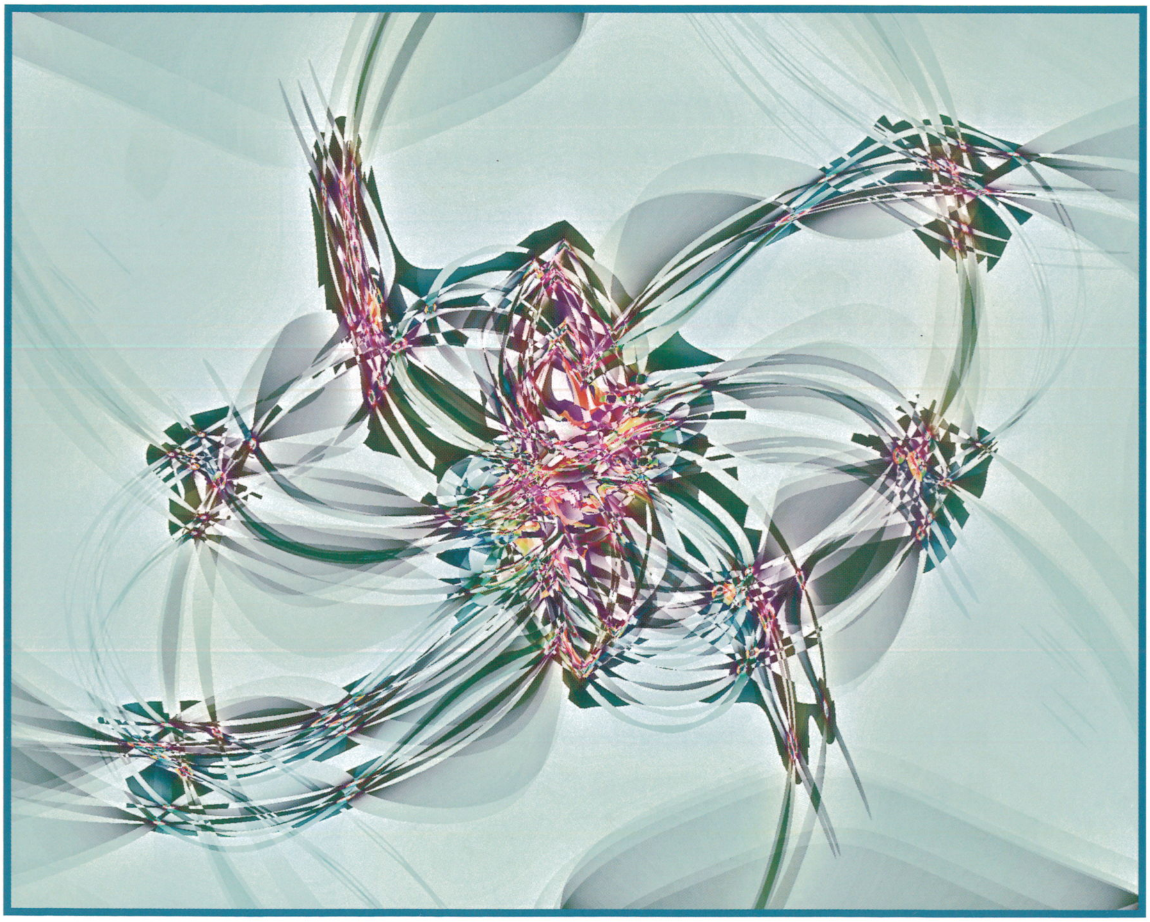
昭和38年7月2日第3種郵便物認可
2012年7月1日発行　第50巻7号　毎月1回1日発行
ISSN 0386—2240

数理科学

7
2012

特集 数学と物理における格子
整然とした形でとらえる数理現象



No.589
サイエンス社

臨時別冊・数理科学（SGC ライブラリ-90：for Senior & Graduate Courses）

アインシュタイン方程式

一般相対性理論のよりよい理解のために

白水　徹也　著

本書はこれまでに得られたアインシュタイン方程式と一般相対性理論の美しい成果を包括的にまとめた．合わせて標準的な教科書ではあまりとり上げられない話題もとり上げている．観測技術の進歩と，adS/CFT 対応に見られるような理論の進展により，物理学が新たな展開を見せつつある中での意義深い一冊．

サイエンス社

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 589 July 2012

数学と物理における格子

整然とした形でとらえる数理現象

表紙：戸川　隼人

お得な定期購読をおすすめします

毎号確実に御手元へ

地域によって書店店頭に陳列されない場合があります．**郵送料小社負担**にて確実に御手元へ届く定期予約購読をおすすめします．

予約購読は１年間（本誌のみ）11,000 円，半年間（本誌のみ）5,500 円．（税込み価格）

造本コストは更に上昇気味です．小社としてもあらゆる努力をもって廉価で提供してゆきたいと思っておりますが，定価改定の止むなき事態がかんがえられます．この場合予約購読期間中のものにつきましては料金据置きとなります．なお，臨時別冊のご注文については，本誌予約購読者の方には，商品到着後のお支払いにて承ります．

お申し込みは本誌とじ込みの振替用紙を御利用下さい．

数理科学特集一覧

63 年/7～2009 年/5 省略
2009 年/6 現象と物理概念を結ぶ方程式
/7 現代物理の世界像
/8 複素数
/9 シュレーディンガー
/10 数学と物理に広がる不変量
別冊 量子重力理論
/11 可積分系の世界
/12《原理》の探求
2010 年/1 無限次元の魅力
/2 数学の可視化
/3 物理数学の効用
/4 現代数学はいかに使われているか［確率編］
別冊 現代幾何学の発展
/5 物理学事始め
/6 現代幾何と方程式
/7 物理学と行列
/8 力の統一にむけて
/9 南部陽一郎
/10 曲面の不思議
/11 連続から離散へ
/12 物理における《破れ》と調和
2011 年/1 数論の探求
/2 物理現象を読み解く数学的手法
/3 方程式と現代代数学
/4 物理学と多様体
/5 初学者を悩ます数理の概念
/6 物理イメージと数式表現
/7 〈隠れた〉物理法則
/8 計算が拓く数学と物理の世界
/9 オイラー
/10 時空と熱力学
/11 線形から非線形へ
/12 物理と仮説
2012 年/1 数学から物理へ，物理から数学へ
/2 古典のススメ［物理編］
/3 量子を操る
/4 量子力学の数学的技法
/5 解析学と物理学
/6 面白い発想［物理編］

数理科学臨時別冊一覧

11 年/6 共形場理論
11 年/9 演習形式で学ぶ相転移・臨界現象
11 年/10 実例で学ぶ 精度保証付き数値計算
11 年/11 リーマン予想の数理物理
11 年/12 量子多体系の物理
12 年/1 現象から方程式を創り出す
12 年/3 演習形式で学ぶリー群・リー環
12 年/4 弦理論の代数的基礎
12 年/5 アインシュタイン方程式
12 年/6 CP 対称性の破れ

「数理科学」のバックナンバーは下記の書店・生協の自然科学書売場で特別販売しております

紀伊國屋書店本店（新宿）
紀伊國屋書店新宿南店
あおい書店中野本店
オリオン書房ノルテ店（立川）
くまざわ書店本店（八王子）
くまざわ書店桜ヶ丘店（多摩）
書泉グランデ（神田）
三省堂本店（神田）
リブロ池袋店
ジュンク堂書店（池袋）
芳林堂（高田馬場）
MARUZEN & ジュンク堂渋谷店
八重洲ブックセンター（東京駅前）
丸善丸の内本店（東京駅前）
丸善日本橋店
丸善多摩センター店
ジュンク堂書店吉祥寺店
ブックファースト青葉台店（横浜）
有隣堂イセザキ町本店（横浜）
有隣堂西口・東口（横浜）
有隣堂厚木店（厚木）
ジュンク堂書店（盛岡）
丸善津田沼店
ジュンク堂書店（新潟）
ジュンク堂甲府岡島店
ジュンク堂新静岡店
戸田書店静岡本店
ジュンク堂大阪本店
紀伊國屋書店梅田店（大阪）
アバンティブックセンター（京都）
ジュンク堂書店（京都）
ジュンク堂京都 BAL 店
ジュンク堂書店三宮店
ジュンク堂三宮駅前店（神戸）
ジュンク堂書店（大分）
喜久屋書店倉敷店
MARUZEN & ジュンク堂広島店
紀伊國屋書店福岡本店
ジュンク堂福岡店
丸善博多店
ジュンク堂鹿児島店
紀伊國屋書店新潟店
ジュンク堂書店旭川店
金港堂（仙台）
金港堂パーク店（仙台）
ジュンク堂書店（仙台）
ジュンク堂書店（秋田）
ジュンク堂書店郡山店
鹿島ブックセンター（いわき）
友朋堂（つくば）

――大学生協・売店――

東京大学 本郷・駒場
東京工業大学 大岡山・長津田
東京理科大学 新宿
早稲田大学 理工学部
慶応義塾大学 矢上台
福井大学
筑波大学 大学会館書籍部 第一学群書籍部
埼玉大学
名古屋工業大学・愛知教育大学
大阪大学・神戸大学 ランス
京都大学・九州工業大学
東北大学 理薬・工学
室蘭工業大学
徳島大学 常三島
愛媛大学 城北
山形大学 小白川
島根大学
学習院大学 成文堂
北海道大学 クラーク店
熊本大学
名古屋大学
広島大学（北１店）
九州大学（理系）

MATHEMATICAL SCIENCES
July 2012 Number 589

数学と物理における格子

薩摩 順吉

広辞苑によれば，格子の最初の項に，「細い角材を縦横，あるいはそのどちらかの方向に間をすかして組んだもの．窓に付ける．また，出入り口に取り付ける格子に組んだ建具.」と書かれている．また，Wikipediaでは，「格子（こうし，英語：lattice）は周期的に並んだ区切り，仕切りのこと．格子戸，鉄格子などとして一般的にも使われる.」となっている．いずれにせよ，整然とした形状のものを指す言葉である．

理学において，古くから水晶などの結晶格子の形が調べられていたが，あくまでも鉱物学としての対象であった．初期の数理的な取扱いで著名なのは，「結晶学の父」と呼ばれるアユイの研究である．18世紀の後半，彼は，結晶面の寸法に関して整数比が成り立つという「有理指数の法則」を提唱し，結晶は小さなユニットの繰り返しでできていると主張した．

その後の仕事で重要なのは，藤原氏・砂田氏の文で紹介されているフランスの数学者ブラベーのものである．19世紀半ば，彼はすべての結晶が14種の空間格子に分類されることを明らかにした．以降，数理的研究が進展することになる．

20世紀に入ると，さまざまな実験が可能となり，結晶の構造が目に見えるようになった．とくに，X線を用いたラウエの実験は有名である．彼はX線が結晶で回折され，特有のパターン（ラウエの斑点）を生じることを明らかにした．この研究は，原子の空間配置を決定するのにも応用される．

20世紀後半におけるコンピュータの登場により，結晶の構造はより詳しく調べられるようになった．準結晶の発見や，結晶中の電子の振舞いの理解など，物性物理学の新しい展開が見られるようになる．これらの内容については，藤原氏・常次氏の文で紹介されている．両氏が指摘しているように，結晶群などを用いた代数的な取扱いが，結晶の理解にきわめて有用である．それだけではない．結晶の数理的構造の追求から，新しい数学的研究も生み出される．砂田氏が紹介しているように，グラフ理論を用いた現代結晶学が，代数幾何学の離散的類似と密接に関係していることが分かってきたのもその１例である．

コンピュータの実用化は，結晶の理解にとどまらず，カオス・フラクタル・ソリトンといった数理物理学上の重要な概念も生み出した．筆者が研究対象の１つとしてきた無限次元非線形可積分系理論の始まりは，非線形偏微分方程式のコンピュータによる数値計算にある．ソリトンと名付けられた安定な非線形パルスがコンピュータ上で発見されたのである．その後，そうした解の存在は方程式のもつ高い対称性に帰因することが示され，ソリトン方程式と総称される非線形偏微分方程式群が見出される．さらにその後の研究の中で，方程

式群の背後に母方程式といってもよい差分方程式があることが分かった．母方程式は連続近似でさまざまなソリトン方程式を生み出す．すなわち離散系が連続系のもとになっているのである．

その１つが，非線形格子の数理モデルである戸田方程式である．戸田格子からは次々と豊かな数理が生み出されている．その詳細については，時弘氏がわかりやすく紹介している．また，ソリトン方程式を中心とした離散可積分系理論の中から，格子に関わる新しい代数も見出されてきた．例えば格子頂点代数もその１つであり，本特集で宮本氏が丁寧な説明を与えている．

カオスの発見もコンピュータ上の数値計算による．生物の増殖過程の連続モデルであるロジスティック方程式を差分化し，コンピュータ上で解を求めた結果として，“カオス”の概念が提出された．カオス的な解は，連続系のロジスティック方程式そのものでは決して得られない．現象の離散モデルである差分方程式を考えて初めて現れるものである．こうした事実は，これまで主流であった連続的な取扱いの他に，離散的な取扱いが欠かせないことを示唆している．

離散的に物事を見ることは，実は古くから行われていた．筆者が紹介するランダムウォークはその１例である．フーリエ，アインシュタインの研究は，まず離散的にモデルを考えるところから始められたと言ってよい．離散的な系は一般に膨大な計算を必要とする．そのために，連続近似を行うことによって，ニュートン以来我々が慣れ親しんだ解析的な道具を使い，科学の大きな進歩を生み出してきたのである．

連続近似を行うことにより，失うものもある．ランダムウォークの稿で触れるように，有限伝搬性が失われるのもその１例である．また，素粒子物理学の場の理論における発散の困難も別の例といえる．後者に関しては，青木氏が，発散の困難を克服するために導入された格子上の場の理論について詳しく説明している．

連続モデルで点対称な現象を扱うためには，直角直線座標よりも極座標を用いるほうが有用であることは周知の事実である．離散的に現象を捉える際にも，同様の工夫が役に立つことがある．古来から，通常の等差差分の他に，q 差分と呼ばれる等比差分も考え出されてきた．場合によっては，もっと巧妙に作られた格子を用意することも必要となる．最近，ソリトン方程式研究の中で，太田氏は時間とともに動くという興味ある差分格子を提案した．ホドグラフ変換を用いた新しい差分格子の構成は，微分方程式の差分化といった実用的な問題にも役立つことが期待される．太田氏はソリトン方程式を例にとって，動く差分格子をわかりやすく解説している．

これまで何百年にわたって連続的な見方，すなわち微分方程式を用いて現象を解析するのが研究の主流であった．ニュートンは，運動法則のうち運動方程式を微分方程式で表し，その解を求めるという手法を提案した．微分方程式に初期条件を与えて積分するという手段が自然科学における一つの決定的な方法になったのである．近代解析学，近代物理学ともにニュートンに始まるといってよいほど，歴史的に重要な一歩であった．

物理学では，連続体，電磁気と対象は拡がっても研究手段は微積分であった．20 世紀になって登場した相対性理論も時空は連続であるという仮定の下に展開されてきた．量子力学は連続的な手法と離散的な手法がともに用いられてきたが，やはり連続的な手法が中心であったと言えよう．

しかし，ニュートンの運動理論を展開するために導入した極限の考えは必須のものであっただろうか．決してそうではない．平均加速度を考えても理論は展開できる．それでは，なぜ離散系を直接扱わないのか．既に述べたように，計算はきわめて面倒であり，かつ見通しが悪いからである．コンピュータの実用化は，こうした状況に大きな変化をもたらした．人力が及ばない大規模な計算が簡単に行えるようになったのである．

離散系の解析には格子の導入が不可欠である．今後，格子に対する理解がより進み，格子を用いた現象の解析がより発展することを期待したい．

（さつま・じゅんきち，青山学院大学理工学部）

結晶格子と準周期格子

藤原　毅夫

1. はじめに

「**格子**」という言葉を『物理学辞典』（培風館，1986年）と『数学入門辞典』（岩波書店，2005年）で調べてみると，数学と物理学の違い（の悪い面）を垣間見るようで面白い．1986年版の『物理学辞典』では「**結晶**内あるいは結晶表面で原子が格子状に配列している状態をいう．」とある．この説明は同義反復で感心しない．『数学入門辞典』には「n次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ の n 個の1次独立なベクトル $\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_n$ をとって，$m_1\boldsymbol{v}_1 + \cdots + m_n\boldsymbol{v}_n$ $(m_1, \cdots, m_n \in \mathbb{Z})$ と表される点の全体を $\mathbb{R}^n$ の格子といい，格子の各点を**格子点**という．」とある．こちらは正確で明快である．明快であるばかりでなく，後で述べる一般化に対しても対応可能である．

固体を電気伝導に関する性質から見れば，絶縁体，半導体，金属に分類される．物質を形成している原子間に働く結合の仕方によって，イオン結合，共有結合，金属結合，水素結合，ファンデルワールス結合などに分けられるが，その結合の違いにより結晶格子の構造にも特徴が現れる．そして，電気伝導に関する性質はその結合の仕組みおよび原子の**実空間**における配置と関係している．半導体では，共有結合が主たる**結合機構**であり，これは化学的な結合の手が結ば作られるため基本的に絶縁体で，硬くかつ結合に方向性があって原子間の空隙が広い．金属は，金属結合すなわち金属電子が全系に広がり糊のような役目を果たして外場に応じて状態を変え，そのために電気伝導が可能であるとともに，軟らかくまた原子配置は稠密な構造をとる．シリコンやゲルマニウムは結晶では典型的な半導体であるが，液体状態では金属となる．構造により結合機構や物性が決まるためである．

炭素の結晶はダイアモンドとグラファイトである．前者における炭素–炭素間の結合は sp^3 結合であり，後者では sp^2 結合で形成された2次元面構造と面間の弱いファンデルワールス結合によっている．それ以外にもフラーレンやナノチューブといった様々な構造をとるが，これらは結合という点からはグラファイトに近い．結晶を形成するときの温度や圧力その他の条件により構造の異なる物質系は多い．

2. 結晶格子

まず**結晶格子**とは何か，そしてその**対称性**についてを説明しよう．この節で説明する結晶，あるいは結晶格子とは「狭義」の結晶であり，現在では**結晶の概念**はもう少し広くなっている．

2.1 平行移動に対する周期構造：並進対称性

3次元結晶格子（crystal lattice）とは，3つの独立な基本ベクトル $\boldsymbol{a}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ により

$$\boldsymbol{t}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3 \quad (n_i = 0, \pm1, \pm2, \cdots) \tag{1}$$

表１　7 つの晶系と 14 のブラベー格子．

晶系	ブラベー格子	基本ベクトルの長さと角度
立方	単純，面心，体心	$a=b=c,\ \alpha=\beta=\gamma=90°$
正方	単純，体心	$a=b\neq c,\ \alpha=\beta=\gamma=90°$
直方	単純，底心，面心，体心	$a\neq b\neq c,\ \alpha=\beta=\gamma=90°$
六方	単純	$a=b\neq c,\ \alpha=\beta=90°, \gamma=120°$
三方	単純	$a=b=c,\ \alpha=\beta=\gamma<120°, \neq 90°$
単斜	単純，底心	$a\neq b\neq c,\ \alpha=\beta=90°\neq\gamma$
三斜	単純	$a\neq b\neq c,\ \alpha\neq\beta\neq\gamma$

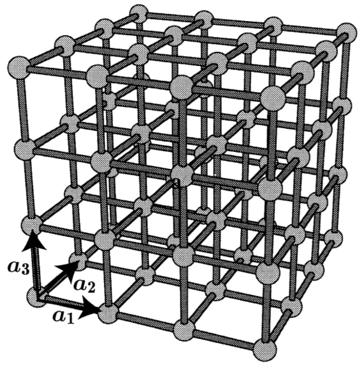


図１　基本ベクトルと結晶格子．

と表される**点の全体**をいう．また格子の各点を格子点という．$\boldsymbol{a}_i$ $(i=1,2,3)$ の 3 つのベクトルで張られる平行 6 面体

$$\{x_1\boldsymbol{a}_1+x_2\boldsymbol{a}_2+x_3\boldsymbol{a}_3 \mid x_i=0,1\} \qquad (2)$$

を**基本単位格子**（primitive cell）という．基本単位格子は格子点 (1) を 1 つだけ含む．各原子が格子点 (1) 上にあるかどうかは問題ではない．また原子の位置は基本単位格子の内側で指定すれば十分であり，平行移動によって図 1 のように全空間に拡げていくことができる．

対称性を考慮し，基本単位格子を 1 個または複数個組み合わせて単位とすることもある．これを**単位格子**という．このようにして作った 3 次元の格子は 7 つの種類（**晶系**あるいは**結晶系**）に分けられる（表 1 と図 2）．各晶系には単純格子（P: 格子点が隅にだけある)，底心格子（C: 底面と上面の中心にも格子点がある)，面心格子（F: すべての面の中心にも格子点がある)，体心格子（I: 体心にも格子点がある）があるものもあり全部で 14

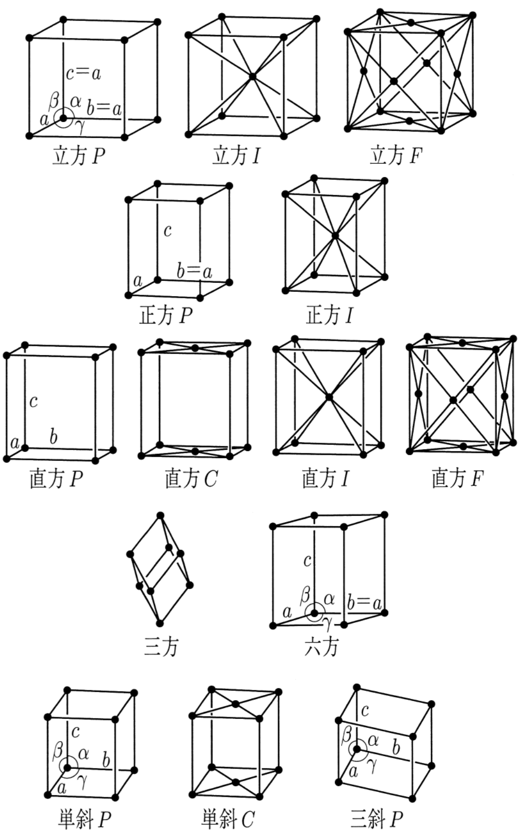


図２　ブラベー格子の基本ベクトルの長さと角度．

種類になる．この 14 種類の（結晶）格子を**ブラベー**（Bravais）**格子**といい，ブラベー格子の単位格子を特に**単位胞**（unit cell）という．

2.2 軸の周りの回転対称性

並進周期性を持った結晶格子には，**並進対称性**の他に，定まった軸の周りの**回転対称性**もある．例えば単純立方格子の格子点上に 1 種類の原子がある結晶では，体心を通り立方体の面の中心を貫く軸の周りの 90° ごとの回転対称性，体心と立方体

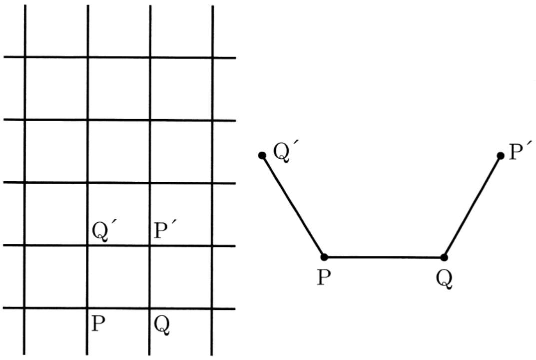


図 3　周期性と回転角.

の各稜の中点を通る軸の周りの 180° の回転対称性，体心と立方体の各頂点を通る軸の周りの 120° 回転対称性がある．また体心を原点とした空間反転 ($\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$) もある．さらにこれらの回転対称性を組み合わせたものも存在し，**対称操作**は全部で 48 個ある．

結晶格子の回転対称性は，その並進対称性と矛盾するものであってはいけない．具体的に理解するために，2 次元平面上の並進周期性を持った格子を考えよう (図 3)．格子上で隣り合った格子点を P, Q とする．P 点を固定しその周りに格子全体を角度 $2\pi/n$ だけ回転すると点 Q は Q′ に移ると仮定する．また Q 点を固定してその周りに格子全体を角度 $2\pi/n$（の ± 整数倍）だけ回転すると点 P は P′ に移るとする．その結果は，2 点 P′ と Q′ が重なる（$n = 6$）か，P′Q′ の距離が PQ の距離の整数倍（$n = 2, 3, 4$）となるかである．このような条件を満たすのは

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6 \qquad (3)$$

の場合だけであることがすぐに分かる．つまり（2 次元平面上の並進周期性を持った）格子において許される回転対称性は，式 (3) の場合に限られる．式 (3) は，実は 3 次元における並進周期性を持った格子についても成立する．格子の持つこのような回転対称性を，n 回回転対称性，回転軸を n 回軸という．

3 次元の結晶の並進周期性と矛盾しない回転操作，つまり $n = 1, 2, 3, 4, 6$ の回転操作だけで作られる群を**結晶点群**という．結晶点群は 3 次元の場合には 32 種に限られている*1)．

結晶格子の中に具体的に原子を配置していくことにより，対称性に様々な制約が与えられる．結晶で許される対称操作としては，並進操作と回転操作が独立の操作である場合だけでなく，基本並進ベクトルより短いベクトルで表される並進操作と回転操作を組み合わせた「らせん」や「映進」と呼ばれる対称操作も，結晶格子と矛盾せずに存在する場合がある．例えば基本並進ベクトルの 1/3 だけ進んで，その並進ベクトルと垂直な面内で 120° 回転する操作が「らせん」であり，回転の代わりに鏡映操作を用いるのが「映進」である．

結晶を不変に保つ並進操作と回転操作およびそれらの組合せの集合が作る群を**空間群**（Space Group）という．3 次元空間群は全部で 230 個ある．そのうち対称操作が回転操作と基本並進操作のみからなるもの（共形空間群）が 73 個で，残りの 157 個が「らせん」や「映進」を含むもの（非共形空間群）である．格子の対称性としては，これらの他にスピンを考慮して 4π 回転で初めて元に戻るとして回転対称性を考える**二重群**や時間反転対称性を加える**磁気空間群**がある[1]．物質構造の対称性は，磁気的性質や圧電性，焦電性等の誘電的性質あるいはそれらが協同した物性の出現を支配しており物質科学においては大変重要な概念である．

■　3. 準結晶：結晶の概念の拡張　■

3.1 準結晶の発見

1992 年に国際結晶学連合による「結晶」の定義が大きく変わった．それまでは式 (1) で述べたよ

---

*1)　$a_0, a_1, a_2, \cdots$ を元とする集合 $\mathcal{G}$ において，任意の 2 つの元の間に演算 · が定義されていて，かつ以下の 4 つの性質が満たされているとき，集合 $\mathcal{G}$ を**群**という．
- 集合 $\mathcal{G}$ の任意の元 a_i と a_j の積 $a_i \cdot a_j$ も集合 $\mathcal{G}$ に属する．
- 結合律：$a_i \cdot (a_j \cdot a_k) = (a_i \cdot a_j) \cdot a_k$ が成立する．
- 単位元 a_0：$a_i \cdot a_0 = a_0 \cdot a_i = a_i$ が存在する．
- 元 a_i の逆元 $(a_i)^{-1}$：$(a_i)^{-1} \cdot a_i = a_i \cdot (a_i)^{-1} = a_0$ が存在する．

うな並進対称性を基本に置き，実空間の構造に基づいた定義であった．1992 年の改定により，結晶の定義を実空間格子の**フーリエ変換**である**回折図形**に基礎を置き，「本質的に離散的な回折図形を示す物質」とされた．したがって前節までに述べた「結晶格子」は「狭義の結晶格子」である．狭義の定義に収まらない結晶とはどのようなものであろうか．それは「**準結晶**（quasicrystal)」と呼ばれる一群の物質群である．準結晶は 1982 年にイスラエルの D. Shechtman らにより発見され[2]，様々な準結晶物質の発見が蔡安邦（東北大）を中心に行われたのち，2011 年にはノーベル化学賞が Shechtman に与えられた．

1982 年 4 月，Shechtman は（人工的な）急冷 Al-Mn 合金の構造を解析中，図 4 左に示すような 10 回回転対称の回折パターンを見出した．すでに述べたように，(狭義の）結晶構造では $n = 1, 2, 3, 4, 6$ に対応して $2\pi/n$ 回転しか許されない．液体やアモルファス等の乱れた非周期構造であるならば，ハローと呼ばれるぼやけた環状のものとなる．彼らが見出した点状のパターンはこれまで（並進周期性を伴う）結晶では見られたことのない新しい秩序構造が存在することを示唆している．詳細な解析の結果，Schechtman の発見した Al-Mn 合金は正 20 面体の対称性を持つことが明らかになったのである．図 4 右には正 20 面体の対称軸の相対関係を示した．

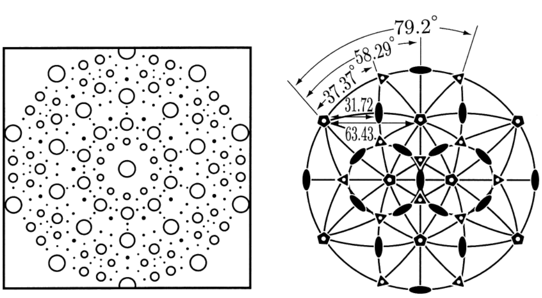


図 4　正 20 面体対称性準結晶の回折パターン．5 回対称性を示す左の図の丸の面積は回折パターンの強度を表すもので，いずれのスポットも広がりのない点状である．右は正 20 面体の対称性の角度依存性を示す．この図の中の 5 角形，3 角形，楕円状に見える 2 つの円が交差したものが，それぞれ 5 回，3 回，2 回回転軸の方向を示している．

回折パターンは物質の実空間構造のフーリエ変換である．そのため回折パターンを詳細に解析し，あるいはそのフーリエ逆変換を行えば物質の原子配置を詳細に知ることができる．液体やアモルファス物質の回折パターンに現れるハローというリング状のパターンは，構造が本質的にランダムであることによる．一方，点状の回折パターンは，そのフーリエ逆変換に，実空間で見るのは難しい秩序配列が存在していることを意味している．したがって上で述べたような結晶概念を回折パターンの点状スポットの存在に拡張するということは，並進周期性という条件を取り払ってなお存在し得る秩序構造にまで，結晶の定義を拡張したということを意味している．それでは並進周期性がなく，しかも**秩序***2) がある構造とはどのようなものであろうか．

3.2 1 次元準周期格子：フィボナッチ格子

並進周期性のない秩序構造を，1 次元の例を見ながら説明しよう．2 次元空間 $\boldsymbol{E}^2$ を 2 つの直交する空間 $\boldsymbol{E}^{\parallel}$, $\boldsymbol{E}^{\perp}$ に分割する．$\boldsymbol{E}^{\parallel}$ は我々の（今考えている）空間，$\boldsymbol{E}^{\perp}$ はそれに直交する空間である．この 2 次元空間 $\boldsymbol{E}^2$ に単位の正方形を考え，その $\boldsymbol{E}^{\perp}$ への射影 $\boldsymbol{W}$ を，窓あるいは許容域と呼ぶことにする（図 5)．2 次元空間 $\boldsymbol{E}^2$ の格子点のうち，

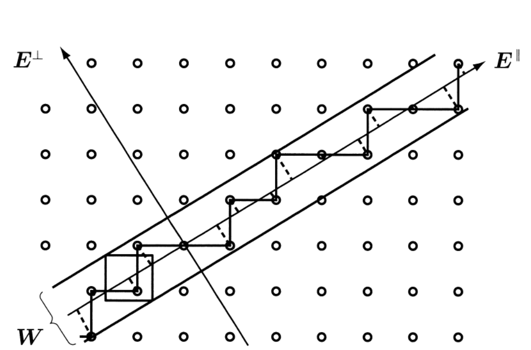


図 5　高次元空間からの射影による準周期構造の構成．

*2)　ここでいう「秩序」とは任意の位置を選んだとき，その周りの構造が距離のいかんに関わらずすべて決まり，かつその決まり方を数学的に一意的に定義することができる，という意味である．

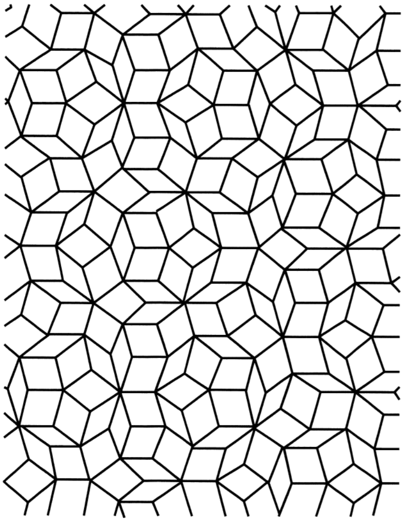


図 6　2 次元ペンローズ格子.

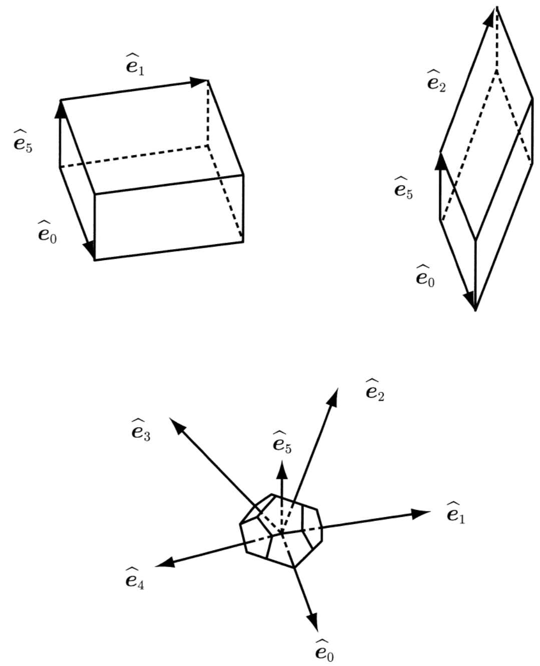


図 7　3 次元ペンローズ格子を構成する 2 つの平行 6 面体[4]．正 12 面体の中心から各 5 角形面へ下した垂線の単位ベクトルを $\hat{\boldsymbol{e}}_j$ $(j=0,\cdots,5)$ とする (図下) と, $(\hat{\boldsymbol{e}}_5,\hat{\boldsymbol{e}}_0,\hat{\boldsymbol{e}}_1)$ が扁平な平行 6 面体, $(\hat{\boldsymbol{e}}_5,\hat{\boldsymbol{e}}_0,\hat{\boldsymbol{e}}_2)$ が尖った平行 6 面体のそれぞれの稜のベクトルとなる.

$\boldsymbol{E}^{\perp}$ 空間で $\boldsymbol{W}$ の中に現れる格子点のみを $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ へ射影したときに, $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ 上に現れる格子点の配置を考える．図 5 で $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ の傾き角を θ と書くと, $\tan\theta$ が無理数である場合には $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ に現れる格子点は準周期 (概周期) 的な配列となる．$\tan\theta=\tau^{-1}=\tau-1$, $\tau=(\sqrt{5}+1)/2=1.6180\cdots$ (黄金比) と選んだときに $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ 上にできる配列を**フィボナッチ格子**という．$\boldsymbol{E}^{\parallel}$ 上に現れる格子間隔は 2 種類で, 長いものを L, 短いものを S と書けば, この 2 つの間隔の比は $L/S=\tau$ であり, それらが現れる個数の比も $n_L/n_S=\tau$ となる.

3.3 3 次元準周期格子：3 次元ペンローズ格子

前小節の方法を用いて 5 次元空間から 2 次元空間への射影を用いて図 6 に示す 2 次元準周期格子 (2 次元**ペンローズ格子**) を構成することができる[3]．

ここでは 3 次元ペンローズ格子を説明しよう[4]．3 次元ペンローズ格子を構成するするためには 6 次元超立方格子からの射影を考えればよいことが知られている．その基本並進ベクトル $\boldsymbol{d}_j$ $(j=1\sim6)$ としては, それらを $\boldsymbol{E}^{\parallel}$ に射影したとき, 正 20 面体の中心から各頂点に伸ばした 6 つのベクトルになるように選ぶ．これらは $\boldsymbol{e}_j$ $(j=1,6)$ を自然な正規直交基底とし, また $(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3)$ が物理空間であるとする．a を格子間隔として

$$
\boldsymbol{d}_j=\sum_{k=1}^{6}M_{jk}\boldsymbol{e}_k,
$$

$$
M=\frac{a}{\sqrt{2(\tau^2+1)}}\begin{pmatrix}\tau & 1 & 0 & 1 & -\tau & 0\\ \tau & -1 & 0 & 1 & \tau & 1\\ 1 & 0 & \tau & -\tau & 0 & 1\\ 0 & \tau & 1 & 0 & 1 & -\tau\\ 0 & \tau & -1 & 0 & 1 & \tau\\ 1 & 0 & -\tau & -\tau & 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{4}
$$

と選ぶ．こうすることにより, $\boldsymbol{d}_i\boldsymbol{d}_j=a^2\delta_{ij}$ を満たしているので格子定数 a である 6 次元超立方格子の基本ベクトルとなる．許容域 $\boldsymbol{W}=\{\boldsymbol{x}^{\perp}|\boldsymbol{x}^{\perp}=\sum_{i=1}^{6}\xi_i\boldsymbol{d}_i^{\perp},\ \xi_i\in[0,1)\}$ は菱形 30 面体という多面体に選ぶ．このようにして, 3 次元の準周期格子が定義される.

ここで定義した 3 次元ペンローズ格子のもとと

なる6次元超立方格子は**正20面体点群**という対称性を満足する．これが（狭義の）結晶の際の結晶点群に対応するものである．これに対して，正20面体点群のいくつかの対称操作を禁止したもの（正20面体点群の部分群になっている）のみ許すなら，より対称性の低い3次元準結晶を考えることができる[5]．

準周期格子はこの他にもいろいろなものが考えられる．

4. 終わりに

20世紀の終わり近くになって矢継ぎ早に，様々な新しい物質，準結晶や高温超伝導体，フラーレンC_{60}，カーボンナノチューブ，グラフェンなどが発見された．カーボンナノチューブを除いて，それらすべてに対してノーベル物理学賞あるいはノーベル化学賞が与えられた．まるで物質科学の時代の終わりを飾るかのように．

古代ギリシャ時代のユークリッド，アルキメデス，さらに代数学者ディオファントス等の後継者は，アラビアに移っていった．その中でも特に，代数学 Algebra の語源として知られる9世紀の数学書 “hisab al-jabr wa’l muqabala”（『約分と消約の計算の書』）の著者モハメッド・ベン・ムーサ（アブー・アブドラー・ムハンマド・イブン・ムーサ・アル・フワーリヅミ）がもっとも偉大な業績を上げ，名高い．それらの成果が，すでに名前の出ているレオナルド・フィリオ・フィボナッチ（1170–1240）の『算盤の書』などを通じて再びヨーロッパに紹介されるという歴史的経緯をたどった．

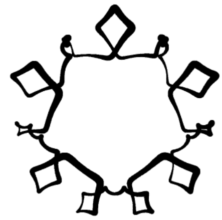
非周期格子構造は，20世紀の新しい発見なのではない．アルハンブラ宮殿のモザイク模様をはじめとして，イスラム圏各地のモスクの装飾模様の中にたくさんの5回回転対称性を持つ非周期格子のパターンが見られる．偶像崇拝禁止という観点から神の像を作ることを厳しく禁止するイスラム教では，モスクを飾る模様のすべては決して単なる装飾ではなく，神を敬う信仰心と神の力の表現だとされる．上で述べた歴史を経た数学の伝統を下敷きとして，イスラムの人々は非周期格子に人知を超えた力を感じたのあろう．それらが今，神の手から人々の手に戻されたのだと思えてならない．宇宙創造の神（神々？）は，準結晶をカムチャッカ半島の山奥の自然物質の中にそっと忍ばせるという悪戯を仕掛けて[6]．

参考文献

1) 犬井鉄郎，田辺行人，小野寺嘉孝，『応用群論　増補版』裳華房（1980）．
2) D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1951.
3) N.G. de Bruijin, *Ned. Akad. Weten. Proc. Ser. A* **43** (1981) 27; *ibid.* **43** (1981) 39.
4) D. Levine and P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B***34** (1986) 617.
5) N.D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **64** (1992) 2.
6) L. Bindi, P.J. Steinhardt, N. Yao and P.J. Lu, *Science* **324** (2009) 1306.

（ふじわら・たけお，東京大学大学総合教育研究センター）

可積分系と格子
戸田格子



時弘 哲治

1. はじめに

ばね定数 k をもつばねに取り付けられた質量 m の質点の運動は，時刻 t における平衡点からの変位を $x(t)$ とすると，ニュートンの運動方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2}=-kx \tag{1}$$

によって記述される．また，速度 c で伝わる理想的な波の時刻 t，位置 x における媒質の変位 $u(x,t)$ は，波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{2}$$

によって記述される．このどちらの方程式も，解に対して重ね合わせの原理が成り立つ線形な方程式であり，一般解や初期値問題の厳密解を求めることができる．ここで，ある解を定数倍したものも，また2つの解を足し合わせたものも同じ方程式の解になることを重ね合わせの原理が成り立つと呼んでいる．一方，重ね合わせの原理が成り立たない非線形な方程式では，解を厳密に求めることは一般には不可能であり，解の存在そのものが保証されないことも多い．しかしながら，初期値問題を厳密に解くことができたり，一つの解から次々と別の解を構成する代数的な手法が存在するなど良い数理構造を持つ一群の方程式系が存在する．これが**非線形可積分方程式系**であり，単に**可積分系**と呼ばれることも多い[*1)]．この非線形可積分方程式系を生み出したのは，電子計算機の発展を契機に行われた1次元格子の振動に対する数値実験である．

1950年代に入って，フェルミ統計やフェルミ粒子で有名な物理学者 Fermi は，Pasta, Ulam とともに，計算機上で熱平衡状態を実現することを試みた．すでに1914年には，熱伝導率が有限であるのは分子振動が(1)のような調和振動子の運動から外れているためであることがDebyeによって示唆されていた．そこで，彼らは，質点に及ぼす力がばねの伸びに比例しない非線形ばねで質点をつないだ1次元格子モデルを考え，その振動を電子計算機により数値的に調べた．当初の予想では，ある程度の時間がたてば，最初に一つのモードに与えられたエネルギーが多くのモードに分配された平衡状態が非線形性によって実現するはずであったが，実際には，同じ初期状態に戻ることが繰り返される再帰現象が観測された．つまり，非線形な相互作用では熱平衡状態を実現することができなかったことになる[*2)]．

およそ10年後の1965年，Fermi–Pasta–Ulam の数値実験に興味を持った Zabusky と Kruskal は，この非線形格子を連続近似し，非線形偏微分

*1） 可積分系は，非線形方程式系を対象とする古典可積分系と可解な量子スピン系や2次元格子模型を対象とする量子可積分系に分けられる．本稿では，断らない限り可積分系とは古典可積分系を意味するものとする．

*2） ただし，この結果は当時の電子計算機の性能が低いためであり，同じ条件の下でも十分な時間が経過すれば再帰現象は見られなくなるようである．

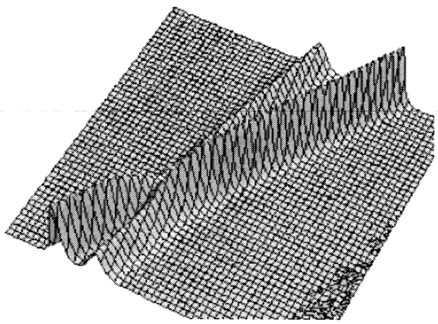


図 1　2 つのソリトンの散乱．

方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \tag{3}$$

を導いた．この方程式は，1895 年に Korteweg と de Vries によって導かれた浅い水路を伝搬する進行波の方程式（**KdV 方程式**）であり，彼らは KdV 方程式を再発見したことになる．KdV 方程式には孤立波解が存在することが知られていたが，さらに，Zabusky と Kruskal は，数値計算によって，周期的な境界条件をつけた KdV 方程式でも再帰現象が見られること，また，孤立波は衝突しても形を変えないことを発見した．そして，この粒子的な振舞いをする孤立波を**ソリトン**（soliton）と名づけた（図 1）．

ソリトンの発見は，物理学者および数学者の非線形波動に対する強い興味を引き起こし，その後爆発的に研究が進展した．1967 年には，初期値問題の解析的な解法（逆散乱法）が示され，KdV 方程式以外にも解析的に解ける方程式系が次々と発見された．その中でも，特に重要な系が同じ 1967 年に戸田盛和によって発見された非線形格子方程式（**戸田格子方程式**）である[1,2]．戸田格子方程式には，可積分系のすべての要素が含まれていると言っても過言ではない．本稿では，戸田格子方程式を通して可積分系の数理構造について見ていきたい．

2. 戸田格子方程式

図 2 のように 1 次元的にばねで結ばれた質点系

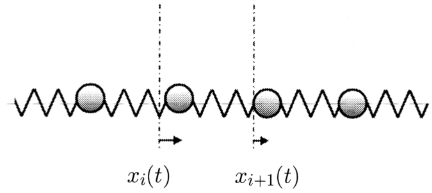


図 2　1 次元格子．

を考える．m を質点の質量，$x_i(t)$ を時刻 t における i 番目の質点の平衡位置からの変位とすると，次のニュートンの運動方程式が成り立つ．

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(V(x_i - x_{i-1}) + V(x_{i+1} - x_i)\right). \tag{4}$$

ばね定数 k の線形ばねのポテンシャルは $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ で与えられるが，戸田盛和は次の指数関数的なポテンシャルを考えた．

$$V(x) = \frac{b}{a}\mathrm{e}^{-ax} + bx \quad (a, b \text{ は定数},\ ab > 0). \tag{5}$$

このポテンシャルをもつ 1 次元の格子を戸田格子，その運動方程式 (4) を戸田格子方程式という．

最初に戸田格子方程式が KdV 方程式と同様にソリトン解を持つことをみてみよう．質点は無限にあり，添え字 i は任意の整数値をとるものとする．$f_i := \mathrm{e}^{-b(x_{i+1}-x_i)} - 1$ とおくと，(4) は

$$\frac{d^2}{dt^2}\log(1 + f_i) = \frac{ab}{m}(f_{i-1} + f_{i+1} - 2f_i)$$

となる．以下簡単のため適当な単位系のもとに物理量を無次元化し $m = a = b = 1$ とおく．

$$\frac{d^2}{dt^2}\log\tau_i(t) := f_i(t) \tag{6}$$

とすると，$\tau_i(t)$ が戸田格子方程式の解を与えるためには，次の式を満たせばよいことがわかる．

$$\frac{d^2}{dt^2}\log\tau_i = \frac{\tau_{i-1}\tau_{i+1}}{\tau_i^2} - 1,$$

あるいは，時間微分を $\dot{\tau}$ で表し

$$\ddot{\tau}_i\tau_i - \dot{\tau}_i{}^2 = \tau_{i-1}\tau_{i+1} - \tau_i^2. \tag{7}$$

このように，(6) に類する変数変換によって，(7) のような従属変数の 2 次同次式になることは，可積分系の一つの特徴である．κ, ω を

$$\omega^2 = \sinh^2 \kappa \tag{8}$$

を満たす定数，θ を任意の定数とすると，簡単な計算によって

$$\tau_i(t) = \cosh(\kappa i - \omega t + \theta) \tag{9}$$

が (7) を満たすことがわかる．これが戸田格子方程式の 1 ソリトン解である．(6) からわかるように，$\tau_i \to \tau_i \mathrm{e}^{A_i(t)}$ ($A_i(t)$ は t について 1 次式) としても戸田格子方程式の解は変わらないので，

$$\tau_i(t) = 1 + \mathrm{e}^{-2(\kappa i - \omega t + \theta)}$$

としてもよい．一般に，正整数 n に対して，$(\kappa_j, \omega_j)_{j=1}^n$ を (8) を満たす互いに異なる定数の組，θ_j ($j = 1, 2, \ldots, N$) を任意の定数，$[n] := \{1, 2, \ldots, n\}$ として，n ソリトン解は

$$\tau_i(t) = 1 + \sum_{\substack{J \subseteq [n] \\ J \neq \phi}} A_J \exp\left[\sum_{j \in J} -2(\kappa_j i - \omega_j t + \theta_j)\right]$$

と与えられることが知られている．ここで A_J は $(\kappa_j, \omega_j)_{j \in J}$ からある手続きで決まる定数である．この表式も可積分系の n ソリトン解によく見られる典型的な表式である．

3. ハミルトン力学系としての可積分性

以下では質点の数を N とし，周期的な境界条件 $x_{N+1}(t) = x_1(t), x_0(t) = x_N(t)$ を考える．規格化した戸田格子方程式 (4), (5) は，運動量 $p_i(t) = \dot{x}_i(t)$ を用いると

$$\frac{d}{dt}\mathrm{e}^{-(x_{i+1} - x_i)} = -(p_{i+1} - p_i)\mathrm{e}^{-(x_{i+1} - x_i)},$$
$$\frac{d}{dt}p_i = \mathrm{e}^{-(x_i - x_{i-1})} - \mathrm{e}^{-(x_{i+1} - x_i)}$$

と表せる．この方程式はハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}p_i^2 + \mathrm{e}^{-(x_{i+1} - x_i)}$$

に対する正準方程式:

$$\dot{x_i} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p_i} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

と等価である．取扱いを容易にするため，Flashka による次の変数変換

$$a_i := \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-(x_{i+1} - x_i)/2}, \quad b_i := \frac{1}{2}p_i \tag{10}$$

を考えると，連立方程式

$$\begin{cases} \dot{a}_i = a_i(b_i - b_{i+1}), \\ \dot{b}_i = 2(a_{i-1}^2 - a_i^2) \end{cases} \tag{11}$$

を得る．ここで，$N \times N$ 行列 $L(t)$, $B(t)$ を

$$L := \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & 0 & \cdots & 0 & a_N \\ a_1 & b_2 & a_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & b_3 & a_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{N-2} & b_{N-1} & a_{N-1} \\ a_N & 0 & \cdots & 0 & a_{N-1} & b_N \end{pmatrix},$$

$$B := \begin{pmatrix} 0 & -a_1 & 0 & \cdots & 0 & a_N \\ a_1 & 0 & -a_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & -a_3 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{N-2} & 0 & -a_{N-1} \\ -a_N & 0 & \cdots & 0 & a_{N-1} & 0 \end{pmatrix}$$

とおくと (11) は

$$\frac{d}{dt}L = BL - LB \tag{12}$$

と表すことができる．(12) を戸田格子方程式の **Lax 形式**と呼ぶ．Tr を行列の対角和とし，$C_m := \mathrm{Tr}[L^m]$ ($m = 1, 2, \ldots$) とする．任意の正方行列 $A(t)$, $B(t)$ に対して成り立つ公式

$$\frac{d}{dt}(AB) = \dot{A}B + A\dot{B}, \quad \frac{d}{dt}\mathrm{Tr}A = \mathrm{Tr}\dot{A},$$
$$\mathrm{Tr}[AB] = \mathrm{Tr}[BA], \ \mathrm{Tr}[A + B] = \mathrm{Tr}A + \mathrm{Tr}B$$

を用いると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}C_m &= m\mathrm{Tr}\left[\dot{L}L^{m-1}\right] \\ &= m\mathrm{Tr}\left[(BL - LB)L^{m-1}\right] \\ &= m\left(\mathrm{Tr}[BL^m] - \mathrm{Tr}[BL^m]\right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

したがって，C_m は時刻 t に依存しない運動の保存量になる．$L(t)$ は実対称行列であるので，一般に N 個の実固有値 $\lambda_j(t)$ $(j=1,2,\ldots,N)$ を持つ．$\mathrm{Tr}[L^m]=\sum_{j=1}^{N}\lambda_j(t)^m$ であることを考えると，N 個の固有値の組は時刻 t に依存せず，$\lambda_j(t) = \lambda_j(0)$ $(j=1,2,\ldots,N)$．少し議論が必要だが，C_m がこれら N 個の固有値の対称式で与えられることにより，$(C_1, C_2, \ldots, C_N)$ は互いに独立な N 個の保存量になる．一般に自由度の半数の独立な保存量をもつハミルトン系は，原理的には求積法によって解を求めることができ，**可積分**と呼ばれる*3)．運動方程式 (11) は自由度 $2N$ のハミルトン系を記述するから，自由度の半数 N 個の独立な保存量をもつ戸田格子方程式は，可積分なハミルトン力学系である．

Lax 形式は，次の連立線形方程式の両立条件とみることができる．

$$\begin{cases} L\psi = \lambda\psi, \\ \dot{\psi} = B\psi. \end{cases} \tag{13}$$

ここでは，$L(t), B(t)$ は与えられた行列とみて，$\psi(t)$ は L の固有ベクトルであり，その固有値が時間に依存しない（**等スペクトル条件**という）ものと仮定している．実際，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(L\psi) &= \dot{L}\psi + L\dot{\psi} \\ &= \dot{L}\psi + LB\psi, \\ \frac{d}{dt}(\lambda\psi) &= \dot{\lambda}\psi + \lambda\dot{\psi} \\ &= 0\cdot\psi + \lambda B\psi \\ &= B(\lambda\psi) \\ &= BL\psi\end{aligned}$$

であるので，

$$\left(\dot{L} - (BL - LB)\right)\psi = 0.$$

L の N 個の固有ベクトルが，N 次元の線形空間の基底になることを考えると，Lax 形式 (12) が成り立つことが上の式が成立するための必要十分条件になる．一般に，可積分系は線形方程式の両立条件として表現される．非線形方程式を線形方程式の両立条件として実現することをその方程式の Lax 形式と呼ぶ．Lax 形式を持つことは可積分系の一つの特徴である．

可積分系では，Lax 形式を用いると，逆散乱法と呼ばれる手法によって初期値問題を解くことができる．2 次方程式では解と係数の関係から，解がわかれば係数も一意に定まる．これと同様に，線形方程式の解（上式では $\psi(t)$）がすべてわかれば，逆に解いて Lax 作用素 (L) が定まる．等スペクトル条件の下では線形方程式の解の時間発展は簡単になるため，初期値が与えられれば解の時間依存性が具体的に定まる．これによって，Lax 作用素の具体的な形がわかり，もとの非線形方程式の初期値問題の解が求まるのである．周期境界条件をつけた戸田格子方程式の場合，保存量により定まる超楕円曲線に付随する Jacobi 多様体上で解の時間発展が線形化され，初期値問題を解くことができる[3,4]．

4. 離散戸田格子方程式

2 次元以上の格子，例えば正方格子を考え，格子点に質点を配置し，質点間に働くポテンシャルを (5) の形に仮定すれば戸田格子の高次元格子への拡張になる．しかしながら，このような拡張では系は可積分にはならない．一つの「可積分性」を保つ拡張は，時間変数を離散化し，空間変数，時間変数ともに格子点上で定義されるとすることである．$(n,t)\in\mathbb{Z}^2$ を格子点の座標として，関数 τ_n^t が

$$\tau_n^{t+1}\tau_n^{t-1} = \left(\tau_n^t\right)^2 + \tau_{n+1}^{t-1}\tau_{n-1}^{t+1} \tag{14}$$

を満たすものとする．少し強引であるが，(14) を

*3) 正確にはこれら N 個の保存量が，Poisson 括弧に関して可換であるとき可積分という．このとき，$2N$ 個の座標，運動量変数は，正準変換によって，N 個の作用変数と角変数の組 (J_i, θ_i) $(i=1,2,\ldots,N)$ に移すことができる．作用変数 J_i は時間とともに変化せず，角変数 θ_i の時間微分も定数となり，初期値問題が解けることになる．これを **Liouville–Arnold の意味での可積分性**ということもある．戸田格子は Liouville–Arnold の意味で可積分である．

(7) の離散類似と考えることにする．このとき，

$$I_n^t = \frac{\tau_{n-1}^t \tau_n^{t+1}}{\tau_n^t \tau_{n-1}^{t+1}}, \quad V_n^t = \frac{\tau_{n+1}^t \tau_{n-1}^{t+1}}{\tau_n^t \tau_n^{t+1}}$$

とおくと，次の連立離散方程式を得る．

$$\begin{cases} I_n^{t+1} = I_n^t + V_n^t - V_{n-1}^{t+1}, \\ V_n^{t+1} = \dfrac{I_{n+1}^t V_n^t}{I_n^{t+1}}. \end{cases} \tag{15}$$

(15) を，**離散戸田格子方程式**と呼ぶ．周期境界条件 $I_{N+1}^t = I_1^t$, $V_{N+1}^t = V_1^t$, $I_0^t = I_N^t$, $V_0^t = V_N^t$ を課すと，$N \times N$ 行列 S^t, R^t を

$$S^t := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & V_N^t \\ V_1^t & 1 & \ddots & \vdots & 0 \\ 0 & V_2^t & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & V_{N-1}^t & 1 \end{pmatrix},$$

$$R^t := \begin{pmatrix} I_1^t & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & I_2^t & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & I_{N-1}^t & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & I_N^t \end{pmatrix}$$

として，(15) は

$$S^{t+1} R^{t+1} = R^t S^t \tag{16}$$

と表される．したがって，$L^t := S^t R^t$ とおくと，

$$L^{t+1} R^t = R^t L^t \tag{17}$$

が成り立つ．これが離散戸田格子方程式の Lax 形式になる．実際，L^t, R^t が与えられたものとして，ベクトル ψ_t に対する連立線形差分方程式系

$$\begin{cases} L^t \psi_t = \lambda \psi_t, \\ \psi_{t+1} = R^t \psi_t \end{cases} \tag{18}$$

を考えると，固有値 λ が t に依存しないとき，$L^{t+1}\psi_{t+1} = L^{t+1}R^t\psi_t$, $\lambda\psi_{t+1} = \lambda R^t \psi_t = R^t L^t \psi_t$ であり，(17) は (18) の両立条件になる．

また $C_m := \mathrm{Tr}[(L^t)^m]$ とすると

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left[(L^t)^m\right] &= \mathrm{Tr}\left[(L^t)^m (R^t)^{-1} R^t\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[R^t (L^t)^m (R^t)^{-1}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[L^{t+1} R^t (L^t)^{m-1} (R^t)^{-1}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[(L^{t+1})^m R^t (R^t)^{-1}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[(L^{t+1})^m\right] \end{aligned}$$

であるので，C_m は時刻によらない保存量になる．前節と同様な議論によって $(C_1, C_2, \ldots, C_N)$ が N 個の独立な保存量になることもわかる．この Lax 形式を用いると，離散戸田格子方程式の初期値問題を解くことができることも連続な戸田格子方程式の場合と同様である[5]．

離散方程式 (14) をさらに拡張したものが次の離散方程式である．

$$\tau_{x+1,y}^t \tau_{x-1,y}^t + \tau_{x,y+1}^t \tau_{x,y-1}^t + \tau_{x,y}^{t+1} \tau_{x,y}^{t-1} = 0. \tag{19}$$

ここで $(x, y, t) \in \mathbb{Z}^3$ は 3 次元の格子点の座標であり，$\tau_{x,y}^t$ は 3 次元の格子点上の関数と考えられる．(19) は，1981 年に広田良吾によって導かれた「可積分」な方程式であり，**DAGTE**（Discrete Analogue Generalized Toda Equation）と呼ばれる[6]．詳細は省略するが，この方程式が戸田格子方程式の一般化であることは，適当な変数変換と連続極限をとることによって，

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} Q_n(x,t) &= \mathrm{e}^{-(Q_n(x,t) - Q_{n-1}(x,t))} \\ &\quad - \mathrm{e}^{-(Q_{n+1}(x,t) - Q_n(x,t))} \end{aligned} \tag{20}$$

となることからわかる．(20) は，**2 次元戸田格子方程式**と呼ばれ，$x = t$ では戸田格子方程式に帰着する．そればかりでなく，(19) からうまく極限操作を行うことによって，KdV 方程式，KP 方程式，修正 KdV 方程式，Sine–Gordon 方程式など，非常に多くの非線形可積分方程式系が導かれる．その意味で，(19) は可積分系においてもっとも根源的な方程式である．非線形可積分方程式の統一理論である **KP 階層の理論**に基づけば[7]，(19) は KP 階層の解を与える τ 関数の満たす双線形恒等

式と本質的に等価であると考えられる*4)．一見単純な関係式に見えるが，そこには可積分系のエッセンスが凝縮している．

5. おわりに

本稿では戸田格子について非線形可積分方程式の観点からその性質を述べてきた．ここでは取り上げることができなかったが，戸田格子の数理構造をみるための他の重要な視点として，微分幾何学あるいはLie代数による特徴づけがある[8,9]．戸田格子方程式が解けることは，Lie群の分解（岩澤分解）などと深く関わっているのである．そのため，戸田格子は行列の LR 分解や QR 分解と関係が深く，数列の加速法などに応用されている[10]．また，戸田格子方程式の拡張としては相対論的戸田方程式，量子戸田方程式，超離散戸田方程式などが提案され研究されている．特に量子戸田方程式はいわゆる量子群の誕生のきっかけになった．量子群の発見により，量子可積分系の表現論的な理解が深まったばかりでなく，新たな数学的対象として爆発的に研究が行われたことは周知の事実である[11]．このように，戸田格子からは次々と豊かな数理が生み出され続けている．筆者の狭い経験からも，可積分系に関して何かアイデアがあれば，まず戸田格子で試してみると非常にすっきりした結果が得られることが多い．逆に戸田格子に適用できなければ，まず他の可積分系にも適用できないようである．

この戸田格子を発見された戸田盛和先生は2010年11月16日に93歳で永眠された．お元気な頃は，先生のお名前を冠し戸田セミナーと名づけていた筆者らの主催するセミナーにときおり出席され，年齢を感じさせない鋭い質問や含蓄のあるコメントをされていた．筆者がとても心残りなのは，出席していただける最後であったかもしれないセミナーの案内をお送りするのを失念してしまったことである．戸田先生は電子メールをご覧になる習慣がなく，封書で案内を出さなければならないことをうっかりと忘れてしまったのである．そのとき以降，先生の奥様の体調が思わしくなく，またいろいろな事情で戸田セミナーの開催そのものが間遠になり，先生がセミナーに来られることは2度となかった．後日お会いしお詫びすることはできたが，今でも大変残念で申し訳なく思っている．

参考文献

1) 戸田盛和：『非線形波動とソリトン』, 日本評論社 (2000).
2) 高崎金久：『可積分系の世界—戸田格子とその仲間』, 共立出版 (2001).
3) 田中俊一，伊達悦朗：『KdV 方程式—非線型数理物理入門』，紀伊国屋書店 (1979).
4) P. van Moerbeke and D. Mumford: “The spectrum of difference operators and algebraic curves”, *Acta Mathematica* **143**, 93–154 (1979).
5) T. Kimijima and T. Tokihiro: “Initial value problem of discrete periodic Toda equation and its ultradiscretization”, *Inverse Problems* **18**, 1705–1732 (2002).
6) R. Hirota: “Discrete Analogue of a Generalized Toda Equation”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50**, 3785–3791 (1981).
7) 三輪哲二，伊達悦朗，神保道夫：『ソリトンの数理』，岩波書店 (2007).
8) A.M. Perelomov: “Integrable Systems of Classical Mechanics and Lie Algebras”, Birkhäuser (1990).
9) M.A. Guest: “Harmonic maps, loop groups, and integrable systems”, Cambridge University Press (1997).
10) 中村佳正編：『可積分系の応用数理』，裳華房 (2000).
11) 神保道夫：『量子群とヤン・バクスター方程式』，シュプリンガー・ジャパン (1995).

（ときひろ・てつじ，東京大学大学院数理科学研究科）

*4) τ 関数の満たす双線形恒等式に三輪変換と呼ばれる離散変数への変数変換を行ったものは，**広田–三輪方程式**，あるいは離散 KP 方程式と呼ばれる．広田–三輪方程式と (19) は単純な変数変換により移り変わり，等価な方程式である．

格子頂点代数

格子が持つ力

宮本 雅彦

格子が色々な現象に現れてくることを，本特集の論説で見てきていると思う．では，そのような現象を数学的に扱おうと考えた場合，どのような方法があるだろうか．まずは，個々の現象から切り離して，格子そのものからどれだけのものが出てくるかを考えるのも，一興である．ここでは，格子から作られる場の理論というものを構成し，その構造を眺めてみよう．

場の理論とは簡単に述べると，互いに影響を与え合う状態の集まりのことである．状態って何と思ったかも知れないが，心配しないで欲しい．数学的に考えるので，状態と言ってもまずは単なるベクトルにすぎない．すると，状態全体の張るベクトル空間 V を考え，V の各元 v が時空間の点 z に依存した影響を V に与えていることになる．この影響も数学的に言えば，V の線形変換を値にとる z を変数とする関数 $v(z)$ ということになる．

場の理論を数学的に記述する一般的方法の一つとして，頂点代数と呼ばれるものがあり，格子 L から定義される頂点代数が目的の格子頂点代数 V_L である．まずは，これの紹介から始めよう．先に謝っておくが，これを数学的にきちんと定義しようとすると，かなり複雑なものとなる．実際，格子は有限次元空間の中の規則正しく並んだ可算個の点の話だが，できあがる場の理論は，無限次元空間の話であり，足し算しか持っていない格子とは大きく違い，無限個の積演算を持っている．

キュービズムの代表であるピカソの「座る女」(同名の絵はたくさんあるが，ニューヨーク近代美術館所蔵のもの）をご存じだろうか．一人の女性を前方から見た図と側面から見た図を融合させて描いた絵である．個人的に美しい絵とは思わないが，融合の仕方，バランス感覚は素晴らしい．格子頂点代数も格子の持つ２つの異なる面を融合したものであり，美しいとは思えないという気持ちまで込めて，この絵と同じ印象を受ける．

同一の持つ異なる面を融合させると，いつも見せている表面的な顔とは全く異なる面を見せてくれる．例えば，格子を -1 倍する変換では，固定される点は原点だけで格子とは言えないが，この変換は格子頂点代数に自然に拡張でき，固定点全体は複雑な場の理論を作り出す．この構造が見せる性質もまた，格子が持つ一面である．また，半単純有限次元リー代数からルート格子が作られるが，逆に，格子から出発しても，格子頂点代数を経由するとリー代数が自然に構成できる．この辺りは，鶏が先か卵が先かの話で面白い．

1. 場の理論と頂点代数

最初に記号を少し導入しておこう．ベクトル空間 U に対して，$U[[z,z^{-1}]]$ で形式的なベキ級数 $\sum_{i\in\mathbb{Z}} u_iz^i, u_i\in U$ 全体の集合を表し，$U((z))$ で負ベキが有界なローレンツ級数 $\sum_{j=r}^{\infty} u_jz^j, r\in\mathbb{Z}, u_j\in U$ 全体からなる $U[[z,z^{-1}]]$ の部分空間を表す．これらの元が今回の主役である．

まず，各状態を元と考え，それら全体の集まり

$$\{v^{(i)} \mid i \in I\}$$

を考える．単純な集合では扱い難いので，それらで張られるベクトル空間

$$V = \left\{ \sum_{i \in I} \lambda_i v^{(i)} \,\middle|\, \lambda_i \in \mathbb{C} \right\}$$

を考える．以下 V の元をすべて状態と呼ぶ．一つの状態 $v^{(i)}$ は状態全体に対して時空間 z に依存した変化を与えている．すなわち，各元 $v \in V$ に対して，V の線形変換を値に持つような z 変数の関数 $Y(v, z)$ を考える．少し正確ではないが，実軸を時間 t（すなわち，1 次元）と考え，$e^{t+i\theta}$ に依存したものだと考えて，フーリエ展開

$$Y(v, e^{t+i\theta}) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} v_m e^{-(m+1)(t+i\theta)}$$

を考える．このとき，v_m は V の線形変換である．言い換えると，各整数 m 毎に，$v, u \in V$ には積 $v \times_m u = v_m u$（m-積と呼ぶ）が定義されていることになる．ここで，$z = e^{t+i\theta}$ と置き直すと，

$$Y(v, z) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} v_m z^{-m-1} \in \mathrm{End}(V)[[z, z^{-1}]]$$

と表示できる．これを v の**頂点作用素**と呼んでいる．当然，V は $v^{(i)}$ たちの線形和なので，

$$Y\left(\sum \lambda_i v^{(i)}, z\right) = \sum \lambda_i Y(v^{(i)}, z)$$

である．場の理論の数学がこれまでの数学と大きく異なるのは，上述の頂点作用素はベキが下に有界でも，上に有界でもないものを使っていることである．例えば，デルタ関数 $\delta(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} x^n$ のように上にも無限，下にも無限となっている関数を考えている．このデルタ関数は，x にどんな実数を入れても値を取ることはない．面白いのは，任意の多項式 $f(x) \in \mathbb{C}[x, x^{-1}]$ に対して，

$$f(x)\delta(x) = f(1)\delta(x)$$

であり，x^{-1} の係数を求める操作 Res_x を使うと，$\mathrm{Res}_z f(x)\delta(x) = f(1)$ となる．

場の理論の公理に従って，V の中に，**真空**と呼ばれる状態 $\mathbf{1}$ を入れる．場の理論では，真空は空集合やゼロではなく，一つの状態と考える．真空は他の状態に影響を与えないので，その頂点作用素は V の恒等写像

$$Y(\mathbf{1}, z) = \mathrm{id}_V \tag{1.1}$$

である．また, すべての状態は, 遠い昔 ($\lim_{t \to -\infty} z = e^{-\infty + i\theta} = 0$ のとき), 真空から派生したと考え,

$$\lim_{z \to 0} Y(v, z)\mathbf{1} = v \tag{1.2}$$

を満たしていると考える．(1.2) を成分で表示すると，$v_n \mathbf{1} = 0\,(n > 0)$, $v_{-1}\mathbf{1} = v$ ということになる．

各元 $v, w \in V$ に対して頂点作用素の作用

$$Y(v, z)w = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n w z^{-n-1}$$

を定めたわけだが，真空のときと同様に，太古では，それなりに定まっていたと考え，$Y(v, z)w \in V((z))$ と考える．

上で述べたことを公理化しておこう．一般にベクトル空間 W とそれ上の線形変換を係数に持つ形式的ベキ級数

$$a(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n z^{-n-1}, \quad a_n \in \mathrm{End}(W)$$

で，任意の $w \in W$ に対して，$a(z)w \in W((z))$ となるとき，$a(z)$ を**量子作用素**と呼ぶ．量子作用素 $a(z) = \sum a_n z^{-n-1}$ に対して，形式的微分

$$\frac{d}{dz} a(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-n-1) a_n z^{-n-2}$$

も量子作用素である．明らかに，W 上の量子作用素の集まりは形式的微分の作用で閉じたベクトル空間となっている．

物理現象を考えた場合，状態 v による影響に続けて状態 u による影響というように，作用の合成を考えるのは自然であるが，上下に有界でない形式的なベキ級数は簡単に積を取ることができない．例えば，

$$\delta(z)\delta(z) = \sum_{n\in\mathbb{Z}}(\cdots+1+\cdots+1+\cdots)z^n$$

は定まらない．ところが，非常にうまい方法が考え出されている．2 つの量子作用素 $v(z) = \sum v_n z^{-n-1}$ と $u(z) = \sum u_m z^{-m-1}$ の合成作用：$v(z)u(z)$：とは，$v(z)$ の z の負ベキ部分を $u(z)$ よりも先に作用させる，すなわち，

$$\begin{aligned}&: v(z)u(z) : \\ &= \left(\sum_{n<0} v_n z^{-n-1}\right) u(z) + u(z)\left(\sum_{n\geq 0} v_n z^{-n-1}\right)\end{aligned}$$

を考えると，これも量子作用素となる．これを**正規積**と呼んでいる．$v(z)$ の過去は $u(z)$ の未来より先に作用させるとでも考えるのだろうか．

場の理論の重要な公理の一つに，一般相対性理論における因果律，または光速度不変の法則と呼ばれるものがある．簡単に言うと，光より早く情報が伝わることはないというものである．ニュートリノが光よりも速いというデータが出たと言って世界を騒がせたニュースはこの公理を否定することになる．時空を一変数 z で表示する正確な手続きを説明していないので，この部分も省略するが，この公理を頂点作用素の言葉で書くと，x, y を 2 変数として，任意の $v, u \in V$ に対して，ある自然数 n があって

$$(x-y)^n\{v(x)u(y) - u(y)v(x)\} = 0$$

となることである．右辺のゼロは，値としてではなく，恒等的にゼロだと言っている．普通の多項式 $f(x,y)$ が $(x-y)^n f(x,y) = 0$ なら，$f(x,y) = 0$ と言えるが，場を表示する頂点作用素では異なる．例えばデルタ関数を見ると，

$$(x-y)\delta\left(\frac{x}{y}\right) = 0$$

であるが，$\delta(x/y) = 0$ ではない．このデルタ関数が重要で，因果律とは，交換子

$$[v(x), u(y)] := v(x)u(y) - u(y)v(x)$$

がデルタ関数 $\delta(x/y)$ やそれらの高次微分たちの線形和になっているということを主張しているのである．別の理解の仕方では，$x = y$ 以外では，$v(x)$ と $u(y)$ が可換になっていることなので，局所可換と呼ばれている．

頂点代数の基本は，状態（ベクトル）と場（量子作用素）の対応が一対一だと考えることである．例えばある状態 v があれば，その量子作用素の形式的微分を与える状態 $T(v)$ もあることになる．また，量子作用素 $Y(v,z)$ が他の量子作用素 $Y(u,z)$ へ影響を与えることでもあり，任意の m-積 $Y(v,z)_m Y(u,z)$ が自然に次のように定義されている．

$k \geq 0$ に対して，

$$Y(v,z)_{-1-k}Y(u,z) = \frac{1}{k!} : \left(\frac{d^k}{dz^k}Y(v,z)\right)Y(u,z) :$$

$$Y(v,z)_k Y(u,z) = \mathrm{Res}_x(x-z)^k[Y(v,x), Y(u,z)].$$

局所可換性は形式的微分や上で述べた m-積との相性が良く，$Y(v,z), Y(w,z), Y(u,z)$ が互いに（自分自身とも）局所可換なら，$\frac{d}{dz}Y(v,z)$ や m-積 $Y(v,z)_m Y(w,z)$ も $Y(u,z)$ と局所可換となる．これが何を意味するかというと，互いに局所可換な量子作用素の集まりから出発して，微分や m-積たちを繰り返していっても，やはり互いに局所可換な量子作用素たちの集まりになり，最終的には互いに局所可換でしかも微分や無限個の m-積によって閉じたものができることになる．これが頂点代数の原型である．

すなわち，頂点代数とは 4 組 $(V, Y, T, \mathbf{1})$ で，V はベクトル空間（状態の空間），T は V の線形変換，$\mathbf{1} \in V$ は真空，そして V の各元 $v \in V$ に対して，線形に V 上の量子作用素（物理の場に対応）$Y(v,z)$ が定義されており，

(1) 真空 $\mathbf{1}$ に対して，(1.1), (1.2) が成り立ち，
(2) $Y(T(v),z) = \frac{d}{dz}Y(v,z)$,
(3) 量子作用素たちはすべて互いに局所可換，

を満たすものである．

$Y(v,z) = \sum v_m z^{-m-1}$ という成分表示で表し

た場合，上の局所可換という曖昧な関係式はボーチャーズの恒等式の一つである

$$[v_m, u_n] = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{m}{i} (v_i u)_{m+n-i}$$

と同値であることが分かる．ここで $\binom{m}{k}$ は 2 項係数 $\frac{m(m-1)\cdots(m-k+1)}{k!}$ である．右辺は一見無限和に見えるが，$Y(v,z)$ は量子作用素なので，十分大きな i に対して，$v_i u = 0$ であり，有限で止まる．

また，V に $\mathbb{Z}$-次数付け $V = \oplus_{n\in\mathbb{Z}} V_n$ を考えることが多い．この場合，$v \in V_{\mathrm{wt}(v)}$ とすると，上の無限個の積に関して

$$v_m : V_n \to V_{n+\mathrm{wt}(v)-m-1}$$

が成り立つことも要請する．このことから，$v \in V_1$ なら，v_0 は次数を保つ作用であり，$(V_1, \times_0)$ で一つの代数となっている．

2. 頂点代数の例 1

格子の一般的な定義は，$\mathbb{Z}$-自由加群

$$L = \mathbb{Z}h^{(1)} + \cdots + \mathbb{Z}h^{(k)}$$

であり，対称内積 $\langle h^{(i)}, h^{(j)} \rangle \in \mathbb{Q}$ を持つものである．この定義から格子は 2 つの側面を持っていることが分かる．一つは，$\mathbb{Z}$-加群であり，もう一つは対称な非退化内積を持つ k-次元ベクトル空間

$$\mathbb{C} \otimes_{\mathbb{Z}} L = \mathbb{C}h^{(1)} + \cdots + \mathbb{C}h^{(k)}$$

に埋め込まれているということである．

まずは，2 つ目の性質だけに注目し，内積空間 $\mathbb{C} \otimes_{\mathbb{Z}} L$ から構成される頂点代数を紹介する．

まず，$h^{(i)}$ に対して形式的なベクトル $h^{(i)}(n)$, $n \in \mathbb{Z}$ を定義し，リー代数の一つであるハイゼンベルグ代数

$$\mathcal{H} = \left(\mathop{\oplus}_{i=1}^{k} \mathop{\oplus}_{n\in\mathbb{Z}} \mathbb{C}h^{(i)}(n) \right) \oplus \mathbb{C}$$

を考える．ここでリー積は

$$[h^{(i)}(n), h^{(j)}(m)] = \delta_{n+m,0}\, n \langle h^{(i)}, h^{(j)} \rangle$$

で定義されている．真空となるべき形式的元 $\mathbf{1}$ を考え，この $\mathbf{1}$ に対して，$\{h^{(i)}(n) \mid n \in \mathbb{Z}, i = 1, \cdots, k\}$ たちを次から次へと作用させ，それら全体の線形和を考えたものが状態の張るベクトル空間 V である．この空間は通常 $M_k(1)$ で表される．ただし，正の作用素 $h^{(j)}(n), n \geq 0$ は $h^{(j)}(n)\mathbf{1} = 0$ として作用し，上で説明したリー積を交換子

$$\begin{aligned} &h^{(i)}(n)h^{(j)}(m) - h^{(j)}(m)h^{(i)}(n) \\ &= n\delta_{n+m,0} \langle h^{(i)}, h^{(j)} \rangle \end{aligned}$$

だと考えることで，V は

$$h^{(i_1)}(-n_1) \cdots h^{(i_k)}(-n_k)\mathbf{1} \quad (i_1 \geq \cdots \geq i_k > 0)$$

の形の元で張られていることが分かる．他に条件をつけていないので，上の形で異なるものたちは一次独立となって $M_k(1)$ を張る．ハイゼンベルグ代数を左からかけるという操作は $M_k(1)$ の線形変換となっていることに注意して欲しい．

$M_k(1)$ を見やすくするために，ウエイト wt を

$$\begin{aligned} &\mathrm{wt}(\mathbf{1}) = 0, \\ &\mathrm{wt}(h^{i_1}(-n_1) \cdots h^{i_k}(-n_k)\mathbf{1}) = n_1 + \cdots + n_k \end{aligned}$$

で定義する．$M_k(1)$ のウエイトは非負整数である．これは，エネルギーは最小数 $\hbar$ の自然数倍しかないという量子力学の考えに従っている．ウエイト n の元の張る斉次空間を $(M_k(1))_n$ と置くと，

$$M_k(1) = \mathop{\oplus}_{n=0}^{\infty} (M_k(1))_n$$

である．容易に，

$$\begin{aligned} &(M_k(1))_0 = \mathbb{C}\mathbf{1}, \\ &(M_k(1))_1 = \mathop{\oplus}_{i=1}^{k} \mathbb{C}h^{(i)}(-1)\mathbf{1} \cong \mathbb{C} \otimes_{\mathbb{Z}} L \end{aligned}$$

である．$M_k(1)_n$ の次元を表示するために，次元を係数とする母関数 $\sum_{i=0}^{\infty} \dim(M_k(1))_m z^m$ を考えると，非常に簡単な式

$$\sum_{i=0}^{\infty} \dim(M_k(1))_m z^m = \left(\prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1-z^j)} \right)^k$$

で記述できる．ここで，$\frac{1}{(1-z^j)} = 1 + z^j + z^{2j} +$

$z^{3j}+\cdots$ である．

定義から

$$h^{(i)}(m):(M_k(1))_n \to (M_k(1))_{n-m}$$

なので，作用のウエイト $\mathrm{wt}(h^{(i)}(m))=-m$ と整合している．この空間上に

$$\begin{aligned} h^{(i)}(z) &= \sum_{m\in\mathbb{Z}} h^{(i)}(m)z^{-m-1} \\ &\in \mathrm{End}(M_k(1))[[z,z^{-1}]] \end{aligned}$$

を考えると，これは $M_k(1)$ 上の量子作用素であり，

$$\begin{aligned} &[h^{(i)}(x),h^{(j)}(y)] \\ &= \left[\sum_m h^{(i)}(m)x^{-m-1}, \sum_n h^{(j)}(n)y^{-n-1}\right] \\ &= \sum_{m\in\mathbb{Z}} mx^{-m-1}y^{m-1} \end{aligned}$$

なので，

$$(x-y)^2[h^{(i)}(x),h^{(j)}(y)]=0$$

となり，互いに局所可換であることが分かる．

それでは，$M_k(1)$ の元に対して頂点作用素を定義していこう．まず，

$$Y(\mathbf{1},z)=\mathrm{Id}_{M_k(1)}$$

と定義し，v に対してすでに $Y(v,z)$ が定義されているとして，帰納的に

$$Y(h^{(i)}(-m)v,z)=h^{(i)}(x)_{-m}Y(v,z)$$

で定義すると，前に説明したように，互いに局所可換な量子作用素が次から次へと定義でき，$M_k(1)$ 全体が頂点代数となる．

3. 頂点代数の例 2（格子頂点代数）

それでは，格子 L の別の一面である群構造を取り入れよう．その群環 $\mathbb{C}[L]$ とベクトル空間 $\mathbb{C}\otimes_{\mathbb{Z}}L$ の元を区別するために，群環 $\mathbb{C}[L]$ を $\oplus_{g\in L}\mathbb{C}e^g$ で表す．$e^g e^h = e^{g+h}$ である．

これまで作った頂点代数 $M_k(1)$ を利用して，

$$V_L=\bigoplus_{g\in L} M_k(1)e^g$$

が目的の格子頂点代数の（状態の張る）ベクトル空間である．ただし，$M_k(1)$ の真空はそれぞれ e^g で置き換えられている．このとき，状態 e^g は，真空と同じようにハイゼンベルグ代数に対する最小ウエイト元であり，ハイゼンベルグ代数の作用は

$$h^{(i)}(n)e^g = 0, \quad \forall n > 0,$$
$$h^{(i)}(0)e^g = \langle h^{(i)}, g\rangle e^g$$

で定義されている．$0 \in L$ に対応する e^0 を考えると，$h^{(i)}(0)e^0 = \langle h^{(i)}, 0\rangle e^0 = 0$ となって真空 $\mathbf{1}$ への作用と一致している．これが V_L の真空である．

e^g のウエイトは $\frac{\langle g,g\rangle}{2}$ で与える．L が偶格子（すべての元の長さの平方が偶数）の場合には，整数ウエイトを与えている．一般の元に対しては，ハイゼンベルグ代数の場合と同じように，

$$\mathrm{wt}(h^{(i_1)}(-n_1)\cdots h^{(i_m)}(-n_m)e^g) = \sum_{i=1}^{m} n_i + \frac{\langle g,g\rangle}{2}$$

で定義する．状態 e^g の頂点作用素 $Y(e^g, z)$ は，

$$\mathrm{Exp}\left(\sum \frac{g(-n)}{n} z^{-n}\right) \mathrm{Exp}\left(\sum \frac{g(n)}{n} z^{n}\right) z^g e^g$$

で与えられる．ここで，右端の e^g はハイゼンベルグ代数の作用とは可換であり，

$$e^g e^h = e^{g+h}$$

と考えることで，$e^g \in \mathrm{End}(V_L)$ と見ることができる．それ以外の作用は，$\mathrm{Exp}(\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k!}$ であり，z^g 等は $e^g_{-1}\mathbf{1} = e^g$ となるための次数合わせ作用である．複雑な定義だが，$\langle g, h\rangle \in 2\mathbb{Z}$ なら $Y(e^g, z)$ と $Y(e^h, z)$ が局所可換となる．すべての内積が偶数であるような格子はこれで希望の頂点代数ができる．それ以外の偶格子の場合にも適切に修正することで頂点代数が構成できる．

4. 応用

4.1 リー代数

偶格子 L の場合には頂点代数 V_L が構成できることを示した．それでは，この格子頂点代数から何が出てくるだろうか？ 最初に L を正定値偶格子としよう．ウエイトはすべて非負となり，

$$V_L = \bigoplus_{n=0}^{\infty} (V_L)_n$$

となる．ここで，$(V_L)_n$ はウエイト n の空間であり，$(V_L)_0 = \mathbb{C}e^0$ である．頂点代数の公理から，$(V_L)_1$ は 0-積で閉じていることが分かるが，この積に関して有限次リー代数となっていることが分かる．すなわち，有限次元半単純リー代数の理論にルート格子が出てくるが，逆に，ルート格子から出発して頂点代数を構成すると，そのリー代数が出てくるのである．また，$v, u \in (V_L)_1$ に対して，$v_1 u \in (V_L)_0 = \mathbb{C}\mathbf{1}$ なので，$v_1 u = (v, u)\mathbf{1}$ で内積 (v, u) を定義すると，これはリー代数の不変内積となる（不変内積を持つ有限次元リー代数からも直接頂点代数が構成できることも記しておく）．

4.2 共形元

L や内積空間 $\mathbb{C} \otimes_{\mathbb{Z}} L$ には当然直交変換と呼ばれる長さも角度も不変にするものが重要な働きをする．より広い範囲で，弦や量子の運動を考えた場合，それらは振動しているので，物体が伸び縮みすることを無視するとしても，局所的には角度を保つことを期待するのは自然である．このような変換を共形変換と呼ぶ．3 次元以上の空間では，完全な共形変換は平行移動や回転や反転しかないが，時空間が 2 次元だと共形変換のなす群は無限の自由度を持っており，場を強く制約してくれる．これはループ代数と呼ばれるリー代数

$$L = \bigoplus_{n\in\mathbb{Z}} \mathbb{C}l(n)$$

を考えることと同じである．ここで，リー積は $[l(n), l(m)] = (n-m)l(n+m)$ で与えられている．例えば，一変数の（正負ベキを考えた）多項式環 $\mathbb{C}[x, x^{-1}]$ に対して，線形変換（微分作用素）$l(n) = -x^{n+1}\frac{d}{dx}$ を考えると，$l(n)l(m) - l(m)l(n) = (n-m)l(n+m)$ を満たしており，微分作用素全体はループ代数となっている．これを中心 $\mathbb{C}$ で拡大したものがヴィラソロ代数であり，各複素数 $c \in \mathbb{C}$ に対してベクトル空間

$$\mathrm{Vir}_c = \underset{n\in\mathbb{Z}}{\oplus}\mathbb{C}L(n)\oplus\mathbb{C}$$

とリー積

$$[L(n),L(m)]=(n-m)L(n+m)+\delta_{m+n,0}\frac{n^3-n}{12}c$$

で定義されるリー代数を中心電荷 c のヴィラソロ代数（の表現）と呼ぶ．

これが格子から自然に構成できるのだろうか？実際，$\mathbb{C}\otimes_{\mathbb{Z}}L$ の正規直交基底 $\{\alpha^{(1)},\cdots,\alpha^{(k)}\}$ を持ってきて，

$$\omega=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\alpha^{(i)}(-1)\alpha^{(i)}(-1)\mathbf{1}\in(V_L)_2$$

と置き，$Y(\omega,z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}}\omega_n z^{-n-1}$ の係数を計算してみると，

$$[\omega_{n+1},\omega_{m+1}]=(n-m)\omega_{n+m+1}+\delta_{m+n,0}\frac{n^3-n}{12}k$$

となるので，$L(n):=\omega_{n+1}$ は中心電荷 k のヴィラソロ代数の関係式を与えている．しかも，$L(0)$ は定義した次数を与え（すなわち，$v\in(V_L)_m$ なら $L(0)v=mv$），$L(-1)$ は微分作用素 T と一致している．このように自然な共形変換も格子そのものから派生していることが分かる．

上のような ω を共形元とかヴィラソロ元と呼んでおり，それらを持つ頂点代数を共形頂点代数と呼び，非常に重要な研究対象となっている．

4.3 指標

$M_1(k)$ のときに，頂点代数 $V=\oplus_{n\in\mathbb{Z}}V_n$ の斉次空間の次元を $q=h^{2\pi i\tau}$ を使って

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}}\dim(V_n)q^n$$

と表示した．中心電荷 k のヴィラソロ元を持った共形頂点代数の場合には，少し変形した

$$\mathrm{ch}_V(\tau)=q^{-k/24}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\dim V_n q^n$$

が非常に良い性質を持つ．実際，V_L の場合に適用すると，中心電荷は k なので

$$\mathrm{ch}_{V_L}(\tau)=\frac{\theta_L(\tau)}{\eta(\tau)^k}$$

となる．ここで，$\theta_L(\tau)=\sum_{g\in L}q^{\langle g,g\rangle/2}$ は L のテータ級数，$\eta(\tau)=q^{1/24}\prod_{m=1}^{\infty}(1-q^m)$ はデデキントのイータ関数である．特に，L が正則格子（L のすべての元との内積が整数である $\mathbb{Q}\otimes_{\mathbb{Z}}L$ の元はちょうど L の元のみ）の場合には，$\mathrm{ch}_{V_L}(\tau)$ はモジュラー関数と呼ばれる特別な関数となる．この性質は，格子頂点代数だからではなく，より広い共形頂点代数においても成り立っている．

4.4 軌道理論

L が自己同型 σ を持つ場合，この自己同型は V_L の自己同型 σ に拡張でき，それによる固定点全体 $(V_L)^\sigma$ を考えることができる．これも頂点代数である．これはもはや格子からでは想像のつかない場の理論であるが，この場の理論も少なくとも格子が持っている性質の一つである．

4.5 頂点超代数

これまで偶格子だけについて説明してきた．すべての内積が整数だが偶格子でないような格子 L に対しても V_L が構成できる．この場合には，局所可換を拡張した超局所可換というものが成り立ち，頂点超代数（またはその拡張）と呼ばれるものになる．

（みやもと・まさひこ，筑波大学大学院数理物質科学研究科）

動く格子

座標変換と差分化

太田　泰広

1. はじめに

本稿では，非線形偏微分方程式の差分化について，**離散可積分系**に関連する話題の中から，座標変換を伴う差分化に関するトピックを取り上げて解説を行う．解の構造を保つように方程式を差分化するためには，その構造を記述するのに適した座標系を見つけることが重要である．**ホドグラフ変換**という座標変換が用いられる場合には，微分方程式を差分化することによって，時間とともに動く差分格子が現れる．その背後には美しい数理的構造があるのだが，差分化においてその構造が主導的役割を果たす様子を具体例に沿って見ていこう．

2. Camassa–Holm 方程式とその解

一般に非線形偏微分方程式を解くことは非常に難しい問題であり，厳密解が解析的に求まることは通常はあまり期待できない．厳密解が求まらないときには微分方程式の差分化を行い，数値的に近似解を求めるのが一つの方法であるが，求まった数値解が偏微分方程式の真の解を精度良く近似しているかどうかを判定することも，また難しい問題である．通常は差分間隔を十分小さく取ることによって数値解が精度の高い近似になることを期待するが，差分間隔を小さく取れば取るほど計算量が増大し計算時間も長くかかる．コンピュータの能力にも限界があるから，できるだけ効率的な差分スキームを考えることが数値解析において重要な課題になってくる．どのようにすれば，限られた計算機資源を有効に使えるような，効率的で精度の高い差分スキームを構成することができるであろうか．それには元の偏微分方程式およびその解の特性を理解し，その特性を正しく再現するような差分化を行うことが重要である．

例として，発展方程式

$$u_t - u_{txx} = 2u_x u_{xx} + u u_{xxx} - 3uu_x - 2cu_x \quad (1)$$

を考えよう[1]．ここで u は (x,t) の関数であり，添字は微分を表す．また c は定数である．(1) は Camassa–Holm 方程式と呼ばれている．この方程式の進行波解，すなわち u が $x-vt$（v は定数）だけの関数になっている解として，図 1 のように鋭いピークをもつ解が存在する．この解は時間とともに，形を変えずに右へ進んでいく．u の値はピークの近傍で急激に変化し，遠方では一定値に近づいている．このような解を数値シミュレーションで再現しようとすると，(1) の右辺で u の x に

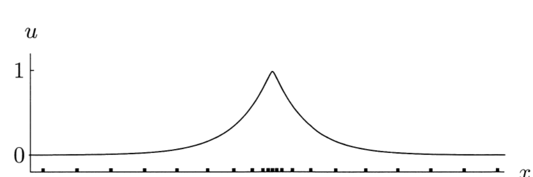


図 1　Camassa–Holm 方程式の進行波解の例．

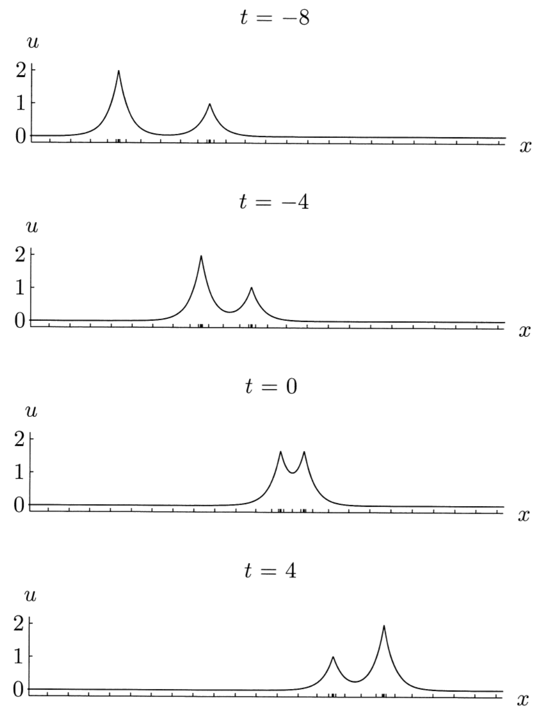


図2 2つの進行波の相互作用の例（時間 t は図の上から下へと進む）．

ついての3階微分まで計算する必要があるため，ピークの近傍で差分間隔を十分小さくとっておかないと誤差が大きくなる．しかし遠方では u の変化は小さいので，差分間隔が大きくても精度にはそれほど影響しないであろう．漫然と等間隔の差分格子を用いたのでは，計算精度を上げるためにピーク近傍での差分間隔を全領域で使うことになり，明らかに計算機資源の無駄遣いである．格子点をピーク近傍に集中させ差分格子を不等間隔にしたほうが良さそうに見える．理論的に求められた適切な格子点の配置の例を，図1の x 軸上に点で印した．計算精度を確保するために，ピークに近づくほど差分間隔が小さくなっている様子がわかるであろう．u の変化が激しい領域に計算機資源を集中投入するのは，効率的な差分スキームを設計するための自然な発想だと思われる．

Camassa–Holm 方程式には図2に示すような，速度の異なる2つの進行波が相互作用している解も存在する．この解を記述するのに効率的な格子点の配置が，図2の x 軸上に点で印されている．どの時刻 t でも2つのピークの近傍に格子点が集中しており，進行波の運動に従って格子点の位置も動いていく様子がわかる．ピークどうしが接近している時間帯におけるピーク近傍での格子点の動きは，一般に複雑なものになることが予想される．そのような格子点の運動をどのように決めたらいいであろうか．数値シミュレーションにおいては，格子点の位置が決まらなければ u の時間発展を計算できない．一方，u のグラフの概形がわからなければ格子点の効果的な配置は決まらない．u と格子は関連し合いながら時間発展していくのである．従って元々の発展方程式 (1) は差分化によって，u についての方程式と格子の運動方程式との結合系に書き換えられることになる．一本の方程式 (1) を複数の方程式の結合系へと分解するやり方は無数に考えられるが，その中から計算効率が良くて精度の高い差分スキームを探し出すことが目標となる．格子が運動していくことによって，u の変化の激しい領域に自動的に格子点が集中し，その結果 u が高精度で計算できるような差分スキームが，望ましい差分化の一つであると考えられる．

以上のように，解きたい偏微分方程式やその解の特性に関する知見は，より良い差分化を考えるための方針を与えてくれる．ところが多くの非線形偏微分方程式の場合，あらかじめ様々な知見がわかっていることは稀だと思われる．そこでまずは，解の特性が良く調べられている方程式の場合を参考にすることにしよう．非線形偏微分方程式の中に，**可積分系**と呼ばれる特殊な方程式のクラスがある．可積分系に対しては様々な特性が非常に詳しく解析されており，厳密解を具体的に構成する方法も知られている．幾つかの典型的な厳密解を例として用いれば，差分化された方程式の数値解と微分方程式の厳密解との誤差を見積もれるので，差分スキームの精度を正確に評価することもできる．さらに可積分系に対しては，微分方程式の様々な構造を忠実に受け継ぐような差分化を考えることができる．すなわち，与えられた偏微分方程式が可積分である場合には，適切な方法に

従って差分化を行えば，差分方程式と微分方程式が共通の性質をもち，同じ挙動を示す解を共有することが保証されるのである．このような差分方程式を離散可積分系と呼ぶ．離散可積分系の差分スキームとしての特徴を分析することによって，様々な偏微分方程式に対する効率的な差分スキームの構成方法を探っていくことは，興味深い研究テーマの一つである．以下では，差分化によって微分方程式が，元々の従属変数と差分間隔についての結合型の差分方程式に書かれるような場合について，可積分系の差分化の方法を具体例に従って解説していく．そこでは，特殊な座標変換が重要な役割を果たす．

3. Dym 方程式とホドグラフ変換

Camassa–Holm 方程式 (1) と同様の性質をもつ非線形発展方程式のうち，最も簡単なものの一つに Dym 方程式

$$u_t = u^3 u_{xxx}$$

がある．これは可積分な方程式であり，様々な性質を解析的に厳密に記述することができる．非線形可積分系の中でも有名な方程式に，変形 KdV 方程式と呼ばれる次のような方程式がある．

$$v_t = v_{xxx} - \frac{3}{2}v^2 v_x. \tag{2}$$

見かけは異なるが，実はこれらの 2 つの方程式は (適当な境界条件を仮定すれば)，互いに変数変換で移り合う同じ方程式なのである．以下でその変数変換を具体的に見ていこう．

変形 KdV 方程式 (2) において $v = w_x$ とおいて x で積分すれば，境界条件を 0 として

$$w_t = w_{xxx} - \frac{1}{2}w_x^3$$

を得る．さらに $u = e^w$ とおけば

$$u_t = \left(u_{xx} - \frac{3u_x^2}{2u}\right)_x \tag{3}$$

となる．ここで独立変数を

$$X = \int^x u\,dx, \quad T = t \tag{4}$$

によって (x, t) から (X, T) に変数変換しよう．このとき

$$\frac{\partial X}{\partial x} = u, \quad \frac{\partial X}{\partial t} = \int^x u_t\,dx = u_{xx} - \frac{3u_x^2}{2u},$$
$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 1$$

であるので

$$\partial_x = u\partial_X, \quad \partial_t = \partial_T + \left(u_{xx} - \frac{3u_x^2}{2u}\right)\partial_X$$

が成り立つ．これによって (3) は Dym 方程式

$$u_T = u^3 u_{XXX} \tag{5}$$

に書き換えられる．

従属変数 u に依存した独立変数変換 (4) は，ホドグラフ変換と呼ばれている．これは空間座標 x のスケール変換の一種であり，解 u に対して空間の各点が u 倍でスケールされている．これこそが前節で述べた，解に応じて定まる不等間隔差分の正体である．ホドグラフ変換によって，空間の各点で座標軸が解の値に応じて引き伸ばされたり縮められたりするのだが，差分化したときにはその拡大縮小率が差分間隔の大きさを決める．その結果として格子は不等間隔になり，かつ時間的にも変化していく．

ホドグラフ変換が (2) を (5) に移したからくりを振り返ってみると，(3) が保存則

$$\rho_t = J_x$$

の形をしていることがポイントであったことに気づく．すなわち変数変換

$$X = \int^x \rho\,dx \tag{6}$$

によって

$$\frac{\partial X}{\partial x} = \rho, \quad \frac{\partial X}{\partial t} = J$$

となり，変換後の方程式に積分が現れない．保存則さえあれば，同様の変数変換によって方程式を書き換えることが可能である（ただし，変換後に

結合型の方程式になる場合もある)．多くの可積分な偏微分方程式に対しては，無限個の保存則が成り立つことが知られている．Dym 方程式の差分化を述べる前に，可積分系の保存則について簡単な例を用いて紹介しよう．

4. KdV 方程式と保存則

KdV 方程式

$$u_t = u_{xxx} + 6uu_x \qquad (7)$$

の解 u に対して

$$\rho_1 = u, \quad \rho_2 = u^2, \quad \rho_3 = 2u^3 - u_x^2,$$
$$J_1 = u_{xx} + 3u^2, \quad J_2 = 4u^3 - u_x^2 + 2uu_{xx},$$
$$J_3 = 9u^4 - 12uu_x^2 + 6u^2u_{xx} + u_{xx}^2 - 2u_xu_{xxx}$$

などとおくと，保存則

$$(\rho_k)_t = (J_k)_x \quad (k = 1, 2, 3)$$

が成り立つことが, 直接計算によって確かめられる．実はこれら以外にも無限個の保存則が成り立っているのだが，それらを統一的に記述するには無限個の時間変数を導入するのが便利である．$x = x_1$，$t = x_3$ とおき，u がそれら以外にも x_5，x_7，$\cdots$ に依存していると見なす．例えば時間変数 x_5 に関する発展方程式を

$$u_{x_5} = u_{xxxxx} + 10uu_{xxx} + 20u_xu_{xx} + 30u^2u_x$$

とすると，これは KdV 方程式 (7) と両立する．すなわち，上式の右辺の x_3 微分と (7) の右辺の x_5 微分は一致する．同様に $x_7, x_9, \cdots$ に関しても相互に両立する発展方程式が存在し，それらの方程式を総称して KdV 階層と言う．KdV 階層の保存則は以下のように一般的に導出できる[2)]．

KdV 方程式 (7) は $u = (2\log\tau)_{xx}$ と変数変換すると双線形形式

$$(D_x^4 - D_xD_t)\tau\cdot\tau = 0$$

に書き換えられる．ここで D は広田の双線形微分演算子である．u が無限個の両立する発展方程

式を同時に満たしていたように，τ も次の無限個の双線形方程式を満たす．

$$\begin{aligned}&\big(p_{2k+1}(D)p_{2l-1}(2D)\\&\quad - p_{2k}(D)p_{2l}(2D)\big)\tau\cdot\tau = 0 \quad (k\ge 0, l\ge 1).\end{aligned}$$

ここで $D=(D_{x_1}, D_{x_3}, D_{x_5}, \cdots)$ であり，$z=(z_1, z_3, z_5, \cdots)$ に対して $p_n(z)$ は

$$\sum_{n=0}^{\infty} p_n(z)\lambda^n = \exp\Big(\sum_{m=1}^{\infty}\frac{z_{2m-1}}{2m-1}\lambda^{2m-1}\Big)$$

で定義される多項式である．$k\ge 1$ のとき上の双線形方程式は

$$D_{x_{2k+1}}D_{x_{2l-1}}\tau\cdot\tau = \big(D_{x_n}\ \text{の 4 乗以上の項}\big)\tau\cdot\tau$$

と書けるから，両辺を τ^2 で割れば

$$(2\log\tau)_{x_{2k+1}x_{2l-1}} = \big((2\log\tau)_{x_m x_n}\ \text{の微分多項式}\big)$$

と書き直せて，低次から逐次計算することにより右辺は u, u_x, u_{xx}, u_{xxx}, $\cdots$ の多項式で書ける．さてここで ρ_{kl} を

$$\rho_{kl} = (2\log\tau)_{x_{2k-1}x_{2l-1}} \quad (k, l\ge 1)$$

と定義しよう．明らかに

$$(\rho_{kl})_{x_{2m-1}} = (\rho_{km})_{x_{2l-1}} \quad (k, l, m\ge 1) \quad (8)$$

が成り立つ．これが KdV 階層の保存則に他ならない．各 ρ_{kl} は u の x に関する微分多項式で書けており，特に $\rho_{11}=u$ なので $k=l=1$ の場合が KdV 階層の方程式そのもの

$$u_{x_{2m-1}} = (\rho_{1m})_x \quad (m=2,3,4,\cdots)$$

を与える．前述の KdV 方程式の保存則は (8) において $l=1$, $m=2$ とした場合に相当する．

一般に可積分系に対しては上記のような無限個の保存則が成り立つので，それらを用いて (6) のような変数変換を施せば，従属変数に依存したスケール変換を伴うような偏微分方程式を，無数に構成することができる．それらの中には曲線の幾何学的運動を記述する方程式など，応用上重要なものも数多く含まれているのだが，ホドグラフ変換を通して構成される方程式系に関しては，差分化の理論も含めて，まだ十分研究されていないようである．

ここで KdV 方程式 (7) と変形 KdV 方程式 (2) は Miura 変換

$$4u = -v^2 - 2v_x$$

で結びついていることをコメントしておく．いま

$$v = \Big(2\log\frac{\sigma}{\tau}\Big)_x \quad (9)$$

とおけば，Miura 変換は双線形形式で

$$D_x^2\sigma\cdot\tau = 0$$

と書かれる．この σ は τ の Bäcklund 変換と呼ばれる．Miura 変換と (2) から (3) への変数変換によって，KdV 方程式の保存則 (8) から (3) の保存則が無限個得られる．また，双線形方程式

$$\begin{aligned}&(D_{x_{2k+1}}D_y - 2\delta_{k0})\tau\cdot\tau\\&\quad + 2p_{2k}(2D)\sigma\cdot\sigma = 0 \quad (k\ge 0) \qquad (10)\end{aligned}$$

からも，KdV 方程式の場合と同様の逐次計算によって (3) の保存則を導出することができる．ここで y は補助的に導入された独立変数である．

5. Dym 方程式の差分化

変形 KdV 方程式 (2) は (9) の変数変換の元で

$$D_x D_y\tau\cdot\tau = 2(\tau^2-\sigma^2), \quad (11)$$

$$D_t D_y\tau\cdot\tau = -4D_x^2\sigma\cdot\sigma \quad (12)$$

と分解される．上式は $k=0,1$ に対する (10) であり，これらから y を消去することによって (2) が得られる．(11) は周期 2 の周期戸田格子方程式の双線形形式に他ならない．また，(12) は高次の戸田格子方程式である．Dym 方程式 (5) の u は (9), (11) を用いれば

$$u = \exp\int^x v\,dx = \frac{\sigma^2}{\tau^2} = 1-(\log\tau)_{xy}$$

と書けるので，(4) で定義される空間座標 X は

$$X=\int^x u\,dx = x-(\log\tau)_y \qquad (13)$$

と表される．このように積分が実行できて X が τ の微分だけで書けてしまうのは，前節の KdV 方程式の例で見たように，保存則が τ についての自明な恒等式に由来していることからも，自然なことであると理解されるだろう．

双線形形式に基づく可積分系の差分化においては，各変数の τ による表示を保ったまま，τ の独立変数だけを差分化する．解のもつ性質が差分化によって変わらないようにするために，連続の独立変数に関する発展を，両立する離散独立変数に関する発展に置き換える．まずは空間を差分化することを考えよう．τ は x の関数なので x を差分化する．このとき戸田格子方程式 (11) は離散時間戸田格子方程式

$$D_y\tau_{j+1}\cdot\tau_j = a(\tau_{j+1}\tau_j-\sigma_{j+1}\sigma_j) \qquad (14)$$

で置き換わる．ここで j は x を差分化した離散独立変数，a は差分間隔である．(13) において x を差分化することによって，X を

$$X_j = ja-(\log\tau_j)_y$$

で置き換えよう．これは j 番目の格子点の位置座標を表している．このとき上の離散戸田方程式 (14) から差分間隔 $\delta_j = X_{j+1}-X_j$ は

$$\delta_j = a-\left(\log\frac{\tau_{j+1}}{\tau_j}\right)_y = a\frac{\sigma_{j+1}\sigma_j}{\tau_{j+1}\tau_j}$$

と計算される．時間 t に関する発展は (12) によって支配されていた．ここで技巧的であるが，時間変数 T を $T=x$ と定義しよう．そうすると (11) より

$$D_TD_y\tau_j\cdot\tau_j = 2(\tau_j^2-\sigma_j^2) \qquad (15)$$

が時間発展を記述する方程式になる．$T=t$ と定義しないのは，(12) が (14) と (15) から導出できる高次の方程式であり，(15) のほうが (12) より基本的な式だと考えられるからである．このような時間変数の取り換えは，より自然な差分化を行うための常套手段の一つになっている．(15) を用いれば $u_j=(\sigma_j/\tau_j)^2$ と δ_j についての方程式

$$\partial_T\delta_j = u_{j+1}-u_j,$$
$$\delta_j^2 = a^2u_{j+1}u_j$$

が得られる．この連立方程式系を Dym 方程式 (5) の空間差分化と見なすことができる．

次に時間も差分化することを考えよう．(15) における T を差分化するので，(14) と同様に

$$D_y\tau_j^{n+1}\cdot\tau_j^n = b(\tau_j^{n+1}\tau_j^n-\sigma_j^{n+1}\sigma_j^n)$$

となる．ここで n は時間を差分化した離散独立変数であり，b はその差分間隔である．この式と (14) から得られる

$$D_y\tau_{j+1}^n\cdot\tau_j^n = a(\tau_{j+1}^n\tau_j^n-\sigma_{j+1}^n\sigma_j^n)$$

とから，$u_j^n=\sigma_j^{n+1}\sigma_j^n/\tau_j^{n+1}\tau_j^n$ と

$$\delta_j^n = a-\left(\log\frac{\tau_{j+1}^n}{\tau_j^n}\right)_y = a\frac{\sigma_{j+1}^n\sigma_j^n}{\tau_{j+1}^n\tau_j^n}$$

についての方程式

$$\frac{1}{b}(\delta_j^{n+1}-\delta_j^n) = u_{j+1}^n-u_j^n,$$
$$\delta_j^{n+1}\delta_j^n = a^2u_{j+1}^nu_j^n$$

が導かれる．これが空間と時間の両方を差分化した離散 Dym 方程式の一つである．

以上のように微分方程式を，それと両立する差分方程式で置き換えるという手法によって，解の構造を保つような差分化が可能になる．その際に鍵となるのが，解を記述するために便利な変数を用いることである．空間座標 X を τ で表示しておき，τ の中のパラメータ x を差分化することによって X を差分化する．差分方程式は u と δ の連立系として書かれ，j 番目の格子点の座標 $X_j^n=ja-(\log\tau_j^n)_y$ は τ を介して時間 n の関数として明示的に与えられる．Dym 方程式の時間と空間が差分化されたとき，変数 u_j^n と差分間隔 δ_j^n の役割が対称的になるところが面白い．

6. おわりに

ホドグラフ変換によって与えられる座標系には

どのような意味があるのだろうか．Dym 方程式の場合と同様の方法で，Camassa–Holm 方程式 (1) の空間変数を差分化した方程式を構成し，それに基づいて比較的安定で精度の良い差分スキームを考えることができる[3]．その際 (1) を

$$(\partial_t + u\partial_x)\log(u - u_{xx} + c) = -2u_x$$

の形に書くことが見通しを良くする．u を速度場と思ったとき，左辺の $\partial_t + u\partial_x$ は速度 u での移流を表しているが，ホドグラフ変換によってこれが単なる時間微分に変換される．すなわち，ホドグラフ変換とは Euler–Lagrange 変換に他ならず，格子点の運動は Lagrange 粒子の運動そのものになっている．ここに精度の高い動的格子差分スキームを考えるヒントがありそうである．

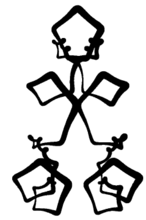
筆者の力不足のため，本稿では可積分系に限った差分化しか述べることができなかったが，他にもより一般的な視点に基づく安定高精度な差分スキームの構成方法が提案されている[4]．方程式がもつ様々な構造に注目し，その構造を保存するような差分化についての研究が進んでおり[5]，読者には様々な差分化の理論に関して，広く文献をあたってみることをお勧めする．

参考文献

1) R. Camassa and D.D. Holm: *Phys. Rev. Lett.*, **71** (1993) 1661.
2) J. Matsukidaira, J. Satsuma and W. Strampp: *J. Math. Phys.*, **31** (1990) 1426.
3) B.-F. Feng, K. Maruno and Y. Ohta: *J. Comput. Appl. Math.*, **235** (2010) 229.
4) T. Matsuo and H. Yamaguchi: *J. Comput. Phys.*, **228** (2009) 4346.
5) D. Furihata and T. Matsuo: *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations*, CRC Press (2010).

（おおた・やすひろ，神戸大学大学院理学研究科）

ランダムウォーク



薩摩　順吉

ランダムウォークはきわめて単純な移動過程のモデルである．単純であるがゆえに，その応用範囲は多岐にわたる．ここでは，そのうち3つの例を挙げて，できるだけわかりやすく紹介していく．

1. はじめに

1980年代の初め，パソコンが身近なものになりつつあるとき，雑誌アスキーにワンラインプログラムコンテストというコーナーがあった．入選作の一つに，酔っ払いが，直線上をふらふらと歩き回り，自宅か居酒屋のどちらに到着するかを見るというものがあった．言語はBASIC，キャラクターも簡単なものであるが，妙に感心したことを覚えている．このデモは**ランダムウォーク**を可視化したものである．ランダムウォークは日本語で酔歩という．まさに，当を射たプログラムである．

図1のように，直線（x 軸）上の離散点を，Δt 毎に移動する生物集団（ここでは羊とする）を考えよう．ただし，羊たちは1回の移動で Δx 離れた隣の点に必ず移るとする．また，羊が右に行く確率と左に行く確率は等しく1/2であるとする．このとき，時刻 t に場所 x にいる羊の総数を $u(x,t)$ で表すと，時間発展は

$$u(x,t+\Delta t)=\frac{1}{2}u(x-\Delta x,t)+\frac{1}{2}u(x+\Delta x,t) \tag{1}$$

で与えられる．これがランダムウォークを表す式である．

いま，羊たちが時刻 $t=0$ で場所 $x=0$ に集中していたとしよう．その後の時間発展を知るためには，(1)式に，初期値，

$$u(0,0)=u_0>0, \quad u(x,0)=0, \quad \text{その他の}\,x$$

を代入し，$u(x,\Delta t), u(x,2\Delta t),\cdots$ を順次求めていけばよい．結果は図2である．羊たちは**2項分布**に従いながら広がっていく．

ランダムウォークの式は u について線形であるので，解の重ね合わせができる．したがって，初期時刻に u が空間的に分布しているとき，すなわ

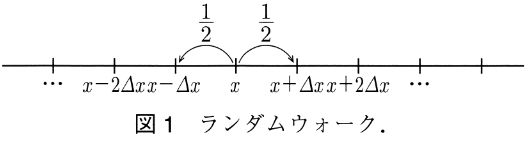


図1　ランダムウォーク．

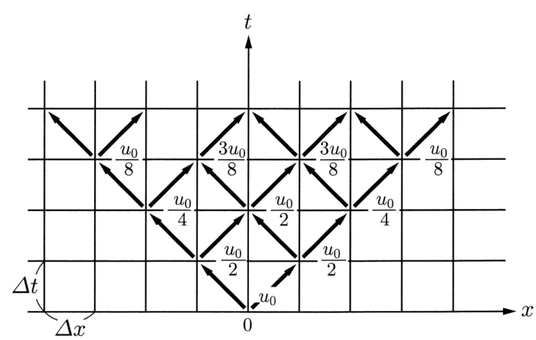


図2　2項分布解．

ち，羊たちがいろんな場所にいるときには図 2 と同じ操作を行い，以降の時刻 $\Delta t, 2\Delta t, \cdots$ においてそれぞれの場所から出発して得られる解を単純に足し合わせればよいことになる．

さて，(1) 式で $\Delta x, \Delta t$ が小さいとして，各項を x, t まわりでテイラー展開すると，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O\left(\Delta t, \frac{(\Delta x)^4}{\Delta t}\right)$$

が得られる．ところで，Δx は羊が 1 回の移動で動く距離，歩幅といってよい，$\Delta x/\Delta t$ は移動の速さである．歩幅と速さの積 $(\Delta x)^2/\Delta t$ が有限の一定値 $(= 2D)$ となるように $\Delta x, \Delta t$ を選び，ともに 0 に行く極限をとると，上式は**拡散方程式**

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{2}$$

に帰着する．すなわち，拡散方程式はランダムウォークの式を連続近似したものである．なお，Δx と Δt の極限は原理的にどのようにとってもよい．例えば，Δt の尺度を大きくして，$(\Delta x)^2/\Delta t$ が 0 にいく極限をとると $\partial u/\partial t = 0$ となる．このとき，u は時間的に変化しない．これも 1 つの解である．ただし，非常に遅い時間スケールで現象を見ただけのことである．

拡散方程式 (2) は 1 つの特解として

$$u(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}}\exp^{-x^2/(4Dt)} \tag{3}$$

をもっている．この解は，$t(>0)$ を固定したとき，**正規分布**の形をしている．また，$t \to 0$ の極限でデルタ関数 $\delta(x)$ になる．

離散的なランダムウォークと連続的な拡散方程式の解は当然関連している．2 項分布の極限として正規分布が得られたのである．ここで，離散から連続に移行したことによる問題点を 1 つ指摘しておこう．ランダムウォークにおいて羊は有限速度で伝搬している．しかし，解 (3) は指数関数的に値が急減少しているとはいえ，瞬時に無限遠まで伝搬している．すなわち形式的に拡散速度が無限大になっている．一般的な現象を考えたとき，この結果は現実的でない．離散モデルの極限をとった微分方程式はあくまでも現象に対する近似式であることを強調しておきたい．

2. 2 次元ランダムウォーク

ランダムウォークの式 (1) は空間 1 次元である．草原を動き回る羊たちを考えるときには，空間 2 次元のランダムウォークを用意すればよい．図 3 のように，xy 平面上に格子を用意し，各格子点を

$$u(x,y,t+\Delta t) = \frac{1}{4}\{u(x+\Delta x,y,t) + u(x-\Delta x,y,t) + u(x,y+\Delta y,t) + u(x,y-\Delta y,t)\} \tag{4}$$

の規則で移動するとすればよい．すなわち，上下左右に羊たちが移動する確率は等しく，1/4 とするのである．

この差分方程式の解の挙動は定性的に 1 次元のものと変わらない．やはり (2 次元の) 2 項分布に従って解は時間発展していく．連続極限も 1 次元のときと同様，各項を x, y, t まわりでテイラー展開すればよい．簡単のために，$(\Delta x)^2/\Delta t = (\Delta y)^2/\Delta t = 2$ とすると，$\Delta x, \Delta y, \Delta t \to 0$ の極限化で

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \tag{5}$$

の 2 次元拡散方程式が得られる．当然，方程式の解も 1 次元の場合と定性的に変わらない．

上式は t 依存性を無視すると，**調和方程式**

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \tag{6}$$

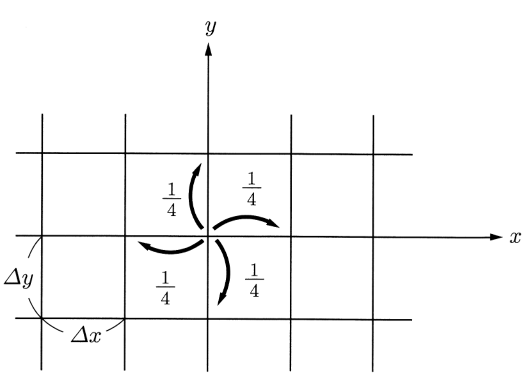


図 3　平面上のランダムウォーク．

になる．元の差分方程式は

$$u(x,y) = \frac{1}{4}\{u(x+\Delta x,y)+u(x-\Delta x,y) + u(x,y+\Delta y)+u(x,y-\Delta y)\} \quad (7)$$

である．この式はある格子点の u の値はまわりの4つの格子点の相加平均であることを示している．従って，まわりの格子点の値とくらべて，大きくも小さくもならない．解はきわめて調和がとれているのである．

3. フーリエの仕事

熱伝導に関するフーリエが提出した理論は物理的に重要であっただけでなく，数学にも大きな変革をもたらした．なお，この理論はちょうど2世紀前の1812年にフランスアカデミーの賞を受けたとのことである．ここでは，フーリエの理論の背景となる簡単なモデルを考え，ランダムウォークとの関連を見ていくことにしよう．

いま，図4のように断面積が S で，均質かつまっすぐな棒の中の温度分布 $u(x,t)$ を考える．物理の本での説明は次のようなものである．棒の微小部分（図の x から $x+\Delta x$ まで）の温度を Δu だけ変えるのに必要な熱量は

$$\sigma\Delta u(\rho S\Delta x) \quad (8)$$

で与えられる．ただし，σ は棒の比熱，ρ は密度である．

一方，時間 Δt の間に点 x を通過する熱量は x 方向の温度勾配と $S\Delta t$ との積に比例し，

$$-K\frac{u(x+\Delta x,t)-u(x,t)}{\Delta x}S\Delta t$$

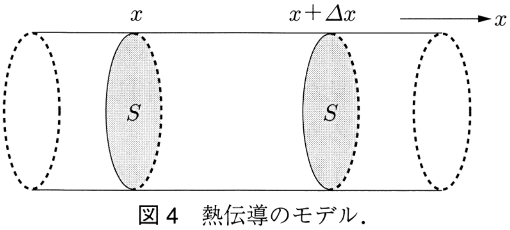


図4　熱伝導のモデル．

と書ける．ただし，K は熱伝導率であり，負符号は熱が高温部から低温部に移動することを表している．また，温度勾配は時刻 t における値で近似している．同様に点 $x+\Delta x$ を通過する熱量は

$$-K\frac{u(x+2\Delta x,t)-u(x+\Delta x,t)}{\Delta x}S\Delta t$$

である．

棒の側面からの熱の出入りはないとすると，時間 Δt の間の熱量の釣り合いは，(温度を変えるのに必要な熱量) = (入ってくる熱量) − (出て行く熱量) であるから，

$$\sigma\{u(x+\Delta x,t)-u(x,t)\}\rho S\Delta x = KS\frac{\Delta t}{\Delta x}\{u(x+2\Delta x,t) - 2u(x+\Delta x,t)+u(x,t)\} \quad (9)$$

が成り立つ．なお，(8) 式における棒の温度変化 Δu は点 x における値で近似している．

この差分方程式はランダムウォークの式と本質的に同様のものである．こじつけだとおっしゃる読者もいるかもしれない．ただ，強調したいことは，現象のモデルを作るとき，通常，思考は離散的であるはずだから，フーリエ自身も上で示したような過程で以下に述べる結果を得たに違いないと言いたいのである．

(9) 式で，$\Delta x, \Delta t$ ともに0に行く極限をとると，ランダムウォークの式同様，拡散方程式 (2) に移行する．ただし，係数 D は物理量を用いて，$K/\sigma\rho$ で与えられる．

フーリエは変数分離を用いて，無限個の解を求め，それらの級数和で初期値・境界値を満足する解を求めた．例えば，棒は無限に長いとし，初期時刻 $t=0$ で温度分布が $u(x,0)=\varphi(x)$ で与えられる場合，解は

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi\frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\exp^{-(x-\xi)^2/(4Dt)}\,d\xi \quad (10)$$

となる．初期値 $\varphi(x)$ をデルタ関数 $\delta(x)$ とした場合が，解 (3) である．無限級数の形で解を与えたことにより，関数概念の拡張を行ったのが，フー

リエの偉大な数学的業績であるが，1 節で指摘した 2 項分布解の足し合わせと基本的精神は同じである．

4. アインシュタインの仕事

1905 年，ベルン特許局の技師であった**アインシュタイン**は，ノーベル賞を授与されてもおかしくない仕事を 3 つも発表した．この年は「奇跡の年」と呼ばれることがある．アインシュタイン，26 歳のときであった．「**光量子仮説**」,「**ブラウン運動の理論**」,「**特殊相対性理論**」が 3 つの研究成果であるが，ノーベル賞は光量子仮説に対してであった．これらの研究が認められ，いまからちょうど 100 年前，母校のチューリッヒ連邦工科大学の教授になったとのことである．

ここでは，統計力学における一大金字塔であるブラウン運動の理論について，彼の考えを辿っていくことにする．ブラウン運動とは，媒質中に浮遊する微小粒子がランダムに運動する現象のことであり，その普遍性を 1827 年に発見したイギリスの植物学者ブラウンにちなんで命名されている．アインシュタインはブラウン運動のことをそれほどよく知っていなかったらしい．しかし，一般的な原理から理論を組み立てるという立場にたって考察を行い，気体分子運動論を基礎に，媒質の分子が微粒子と衝突する現象であることを示した．

文献 1) におさめられたブラウン運動に関するアインシュタインの最初の論文は「静止液体中で浮遊している微粒子の熱分子運動論から要求される運動について」である．発表は奇跡の年，1905 年．

この論文では，まず各粒子の運動は独立であるとし，観測時間よりは短いが，互いに独立と考えられるほどには長い時間間隔 τ を導入する．さらに系の中に n 個の粒子が浮いていて，τ 時間に位置 x から Δ 動くとする．ただし，Δ は確率的に定まるものと仮定する．このとき，時間 τ の間に変位が Δ と $\Delta + d\Delta$ の間にある粒子の数 dn は

$$dn = n\phi(\Delta)d\Delta$$

と書けることになる．ただし，$\phi(\Delta)$ は変位に対する確率密度である．

以上の条件の下で，時刻 t に位置 x にある単位体積あたりの粒子数 $u(x,t)$ に対して，

$$u(x,t+\tau)=\int_{-\infty}^{\infty} u(x+\Delta,t)\phi(\Delta)d\Delta \quad (11)$$

が成り立つ．アインシュタインは，この式を x,t まわりでテイラー展開し，近似的に拡散方程式 (2) を導いた．ただし，拡散係数 D は

$$D = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2}\phi(\Delta)d\Delta$$

で与えられる．この仕事のポイントは，適切な時間スケール τ と確率的な考え方を導入したことにある．

アインシュタインはこの結果を用いて，粒子の拡散や分布といった長時間挙動から原子の実在が立証できると予想し，物性理論に大きなくさびを打ち込んだのである．後ほど彼の予想は正しいことが，実験的に確かめられることになる．

その後，ある教授（論文では Prof. R. Lorentz と書いてあるが，相対論で有名なローレンツとはイニシャルが異なっている）から，化学者にもわかるような理論を展開してほしいとの要請を受け，1908 年に「ブラウン運動の基礎理論」という論文を発表している．その論文の一部をおおざっぱに引用しよう．

いま，溶媒で満たされ，水平（x 軸とする）におかれた円筒容器中での粒子の運動を考える．溶媒の中で，時刻 t に位置 x にいた粒子が熱運動によって，時刻 $t+\tau$ に $x+\Delta_1$ の場所に移動したとする．他の粒子も同様に，$\Delta_2, \Delta_3, \cdots$ だけ変位したとする．当然，いくつかの粒子は左へ，いくつかの粒子は右へ動く．それらの変位は粒子毎に異なっているが，ある粒子の位置は他の粒子によって影響を受けず，溶媒の影響を受けるだけなので，平均的に見たとき，左右に同じ距離動くと考えてよいであろう．

このモデルは 1 節で紹介したランダムウォークに他ならない．先に述べたように，アインシュタ

インは一般的な原理から理論を組み立てるという立場にたって考察を行う研究姿勢を持っていた．1905年の論文には，このランダムウォークのことについては一切触れていない．しかし，そのときこの簡単なモデルを意識していたのかもしれない．とにかく，ランダムウォークを基礎としてブラウン運動の理論を打ち立てたといってよい．

1908年の論文では，さらにランダムウォークの式から拡散方程式を導いて，拡散係数が

$$\frac{1}{2}\frac{\Delta^2}{\tau}$$

であることを示し，原子の実在の立証をより強固なものにしている．

5. ブラック・ショールズの仕事

1997年，ショールズとマートンは**デリバティブ**（金融派生商品）**価格付け理論**の研究を評価され，ノーベル経済学賞を受賞した．彼らの仕事はデリバティブ価格を満たす**ブラック・ショールズ方程式**に関するものである．ここでは，ブラック・ショールズ方程式がやはり，ランダムウォークの式から得られることを，文献2)を参考にして紹介しよう．

まず，デリバティブ価格付けに関わる金融の基礎用語を簡単に説明する．**先物**とは，金融商品をあらかじめ契約書に書いてある金額で満期時に買う（もしくは売る）ことを決めておく契約のことである．金融商品は何でもよい．株式，金，小麦，不動産など，おおよそ人間生活に関わるものすべてが対象となる．買う契約をした場合，満期時に金融商品が値上がりしていれば得をし，その分の金額を受け取る．値下がりしたときは損をし，その分払わなければならない．契約時点ではお金を払う必要がなく，満期時にお金のやりとりをするのである．

コールオプションとは先物買いの契約に，契約を履行しなくてもよいという選択権を付与したものである．満期時に契約金額より金融商品が値上がりしているとき，先物で買う契約をした側は契約を行使して，商品を時価より安く買うことがで

き，得をする．逆に，満期時に契約金額より商品が値下がりしているときは，付帯条項を利用して契約を破棄し，やりとりが行われない．当然のことながら，コールオプションを契約した側が有利になるので，その対価を契約時に払わなければならない．

デリバティブとは上記の金融商品から派生した金融商品のことをいい，その金額を決める式として提案されたのが，ブラック・ショールズ方程式である．方程式を導くには，もう一つ**無裁定**という考えが重要になる．噛み砕いて述べると，ギャンブルには必ず勝つ，必ず負けるということはなく，結果は公正でなければならないというわけである．もちろん，実際のギャンブルでは胴元の取り分があって，必ず負けることになっている．以下，無裁定の条件を課して，その導出を見ていこう．

まず，金融商品の1つとして，株 $S(t)$ を考え，単位時間1の後に確率 $1/2$ で $S(t+1)=(1+u)S(t)$，また，確率 $1/2$ で $S(t+1)=(1-d)S(t)$ になるとする．すなわち，$u=d$ とすると，株価の変化は1節で述べた対称なランダムウォークの時間発展そのもの，$u\neq d$ のときは左右で進む距離が異なる場合の非対称なランダムウォークの時間発展とするのである．後者の場合も取扱いはそれほど変わらない．

もう一つの金融商品として，安全債券 $B(t)$ を考える．安全というのは，単位時間の後に確率1で $B(t+1)=(1+r)B(t)$ になることを意味する．すなわち，B は時間とともに複利で増加していくのである．

株と債券の組合せで**複製ポートフォリオ**（$t=1$ での値がコールオプションの支払いと一致するもの）を作ろう．時刻 $t=0$ で株を割合 p，債券を割合 $1-p$ で持っているとする．すなわち，合計

$$pS(0)+(1-p)B(0) \qquad (12)$$

相当の価値を持っているとする．時刻1において，株が上がった場合は，合計 $V_u=p(1+u)S(0)+(1-p)(1+r)B(0)$ の価値になり，株が下がった場合は，合計 $V_d=p(1+d)S(0)+(1-p)(1+r)B(0)$ の価値になる．

行使価格 $C(1)$ のコールオプションを考えると，株が上がったときは $p(1+u)S(0)-C(1)$ が儲けであり，下がったときは受け取り0である．ポートフォリオの条件から，

$$V_u=p(1+u)S(0)-C(1),\quad V_d=0$$

が成り立つ必要があり，2つの式から p が得られる．そして，その値を (12) 式に代入すると，無裁定の条件からコールオプションの $t=0$ における価格 $C(0)$ が求まるというわけである．

より一般的に満期時を T とし，$t=0$ から $t=T$ までの投資を考える．さらに，ポートフォリオとしては，株とコールオプションの組合せで，無リスク（株が上がっても下がっても損得なし）のものを構成する．すなわち，時刻 t で $pC(t,S(t))+(1-p)S(t)$ の価値を持っているものは，次の時刻で，株が上がったときは，

$$pC(t+1,(1+u)S(t))+(1-p)(1+u)S(t)$$

となり，下がったときは

$$pC(t+1,(1-d)S(t))+(1-p)(1-d)S(t)$$

となるが，これらが等しいものをつくるのである．この条件から得られた p を上式に代入し，無裁定の条件から，その値が安全債券を運用した場合と同じであるとすると，次の差分方程式が得られる．

$$\begin{aligned}
&C(t+1,S(t))-C(t,S(t))\\
&+\frac{r-\mu}{2\sigma}\{C(t+1,(1+u)S(t))\\
&-C(t+1,(1-d)S(t))\}\\
&+\frac{1}{2}\{C(t+1,(1+u)S(t))\\
&-2C(t+1,S(t))+C(t+1,(1-d)S(t))\}\\
&-rC(t,S(t))=0. \qquad (13)
\end{aligned}$$

ただし，$u=\mu+\sigma, d=\mu-\sigma$ としている．この式も本質的にはランダムウォークの式である．デリバティブ価格は $C(0,S)$ であり，境界値 $C(T,S)$ を与えて (13) 式を解けば，価格が求まることになる．

ブラック・ショールズ偏微分方程式は，(13) 式の連続極限をとることによって得られる．そのためには，時間間隔を Δt とし，μ を $\mu\Delta t, \sigma$ を $\sigma\sqrt{\Delta t}$ として，$\Delta t \to 0$ とすればよい．結果は

$$\frac{\partial C}{\partial t} + rS\frac{\partial C}{\partial S} + \frac{1}{2}\sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} - rC = 0 \quad (14)$$

である．

ブラックとショールズ自身は**伊藤の確率微分方程式**

$$df(W_T) = \frac{df(W_t)}{dW_t}dW_t + \frac{1}{2}\frac{df^2(W_t)}{dW_t^2}dt$$

をもとに，(14) 式を導いている．しかし導出の原理はランダムウォークと同じであるといってよい．彼らは，拡散方程式を拡張した (14) 式を，満期条件 $C(T, S) = \max(S - K, 0)$ の下で解き，デリバティブ価格 $C(T, S)$ に対する式を与えたのである．

なお，ノーベル賞を受賞したロバートとマートンは実際にヘッジファンドの経営に参画したが，巨大な損失を出したとのことである．世の中は人間が簡単に理解できるほど単純なものではないことを示している．

6. おわりに

ここまで，歴史的に重要な 3 つの仕事について，その基本が簡単な 1 次元格子モデルであるランダムウォークで説明できることを示してきた．どの仕事も，連続近似を行い，偏微分方程式で最終的な結果を出している．それらはどれも，それぞれの分野で新しい研究方向を生み出したものである．

コンピュータの登場は，連続近似をしなくても，直接離散的な格子に対して計算を行い，結果を得る可能性を与えた．今後，そうした研究からさらに新しい分野が出てくることを期待したい．

参考文献

1) A. Einstein: *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*, Dover (1956).
2) 藤田岳彦：『道具としての金融工学』，日本実業出版社 (2005).

（さつま・じゅんきち，青山学院大学理工学部）

物性物理と格子

常次　宏一

1. はじめに

物理の様々な分野の中でも，物性物理ほど格子という概念と長くかつ密接に関わってきた分野はないだろう．物性物理は液体ヘリウムやソフトマターなどを含む非常に大きい分野であるが，本記事では筆者の専門である，結晶を中心とする固体物理分野および関連した平衡系統計物理に話を絞って，格子が果たしている役割の重要さと面白さを紹介する．

2. 結晶格子——対称性の破れと群論の舞台

固体の中では原子またはイオンが周期的に配列しており，この周期配列を**結晶格子**，あるいは省略して**格子**と呼ぶことはご存知であろう[1)]．格子が存在することによって結晶の多くの性質が現れることは驚くばかりである．

最初に，簡単ながら奥が深いところから出発しよう．ノーベル賞受賞者フィル・アンダーソンの教科書の冒頭部には，英語辞典の編纂で有名なサミュエル・ジョンソンがバークレイ主教の主張する唯心論に反駁するために，大きな石を蹴飛ばしたという英米で有名なエピソードが述べられている[*1)]．ジョンソン博士は石が硬いということを実存の証として使ったわけだが，その原因が結晶格子の存在にあることは知らなかっただろう．

アンダーソンが教科書で取り上げている主題は，**硬さ（剛性）**[*2)]という性質が，**対称性の自発的破れ**の必然的帰結として現れるという物性物理における重要な一般原理である．南部陽一郎先生のノーベル賞受賞以来，対称性の破れという概念は一般にも広く知られるようになった．物質が非常に多様性に富んでいて，磁性体や超伝導体など異なる性質を示すのは，それぞれ違う種類の対称性が破れているからである[*3)]．

結晶において破れている対称性は**空間並進対称性**すなわち簡単に言うと空間の一様性である．どんな結晶もうんと高温にするとドロドロに熔けて液体になるか気化する．液体や気体においては，すべての原子を同時に同一距離ずらしてもマクロな状態としては元の状態と何ら変わらないので，並進対称性が破れず保存している[*4)]．温度が下がって結晶になると，並進操作を行ったとき，ずらした格子が元のものとぴったり重なる場合に限って元の状態と同じになる．

このことを少しだけ数学的に記述してみる．系の状態を特徴づける代表として場所 $\boldsymbol{r}$ における原

---

*1)　アンダーソン『凝縮系物理学の基本概念』（松原武生訳，吉岡書店）．

*2)　この場合の結晶の剛性はより正確には剪断弾性率である．超伝導の場合には，凝縮しているクーパー対の波動関数の位相を空間的に変化させることに対する硬さとなって現れる．

*3)　磁性体の場合には電子のスピンの回転あるいは反転対称性の破れがおこっている．また，超伝導体においては電子数保存に対応するゲージ対称性が破れている．

*4)　物体の境界のことは考えないことにする．

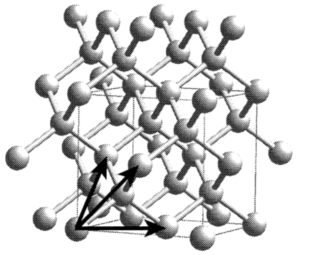


図1 ダイアモンドの結晶格子と基本並進ベクトル．空間群は $Fd\bar{3}m$ (No.227).

子密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ を用いて，距離 $\boldsymbol{R}$ だけ移動する並進操作を $\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}\rho(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$ と定義する．対称操作とは $\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}\rho(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r})$ となるものである．$\rho(\boldsymbol{r})$ を変化させない対称操作は繰り返してもやはり $\rho(\boldsymbol{r})$ を変えないので，これらの集合 $G_T=\{\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}|\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}\rho(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r})\}$ は掛け算について群を作る．実は距離 $\boldsymbol{R}_1$ と $\boldsymbol{R}_2$ の移動を続けて行った結果は，距離 $\boldsymbol{R}_1+\boldsymbol{R}_2$ の移動と同一である．$\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}_1}\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}_2}=\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}_1+\boldsymbol{R}_2}=\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}_2}\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}_1}$．このことより G_T は可換群であることがわかるので，移動操作そのものよりも対応する距離ベクトルのつくる集合 $L_T=\{\boldsymbol{R}|\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}\rho(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r})\}$ を考えたほうが便利である．こちらは足し算について群を作っている．液体などの完全に並進対称な系においては任意の移動操作について不変なため，$L_T^0=\mathbb{R}^3$ であるが，結晶の場合には離散的な移動しか許されない．

$$L_T=\{l_1\boldsymbol{a}_1+l_2\boldsymbol{a}_2+l_3\boldsymbol{a}_3|l_i \text{ はすべて整数}\}. \quad (1)$$

ここで $\{\boldsymbol{a}_i\}$ は**基本並進ベクトル**と呼ばれ，空間が3次元なので3つある (図1)．この集合 L_T が格子そのものに他ならない．

一般論によると，対称性の破れを表す**秩序変数**(**オーダーパラメータ**)は元の対称性と残った対称性に対応する2つの群の商群として定義される．今の場合には $\mathrm{UC}=\mathbb{R}^3/L_T=\{s_1\boldsymbol{a}_1+s_2\boldsymbol{a}_2+s_3\boldsymbol{a}_3|$ すべて $0\leq s_i<1\}$ となり3次元トーラスと等価であるが，物理的には結晶の単位胞を表し，その要素は格子の原点の位置を意味している．

ここまでは簡単な性質をわざわざ群論を持ち込んでわざわざ難しくしているように感じられるかもしれないが，実はこれが結晶構造の理解のための強力な手段になる．その理由は並進対称性が破れると必然的に**空間回転対称性**も破れ，$\rho(\boldsymbol{r})$ を変化させない回転操作が強い制限を受けるためである．回転対称性が破れることは，基本並進ベクトルが空間の特定の方向を向いていることから理解できる*5)．許される回転操作に加えて，鏡像と呼ばれる平面に関して反転する対称操作も存在することがあり，これらは掛け算について群を作る．これは**点群**と呼ばれている．さらに離散的な並進対称性と点群を組み合わせたものは**空間群**と呼ばれる．与えられた物質の結晶構造を考えることは，数学的にはその空間群を決定することである．3次元空間では点群は32種類あり，空間群は230種類ある．点群および空間群は一般的に非可換群であり，その分類は群論の華々しい応用例といえる．本稿ではこれらの詳細には立ち入らないが，結晶格子は群という数学的構造をもっており，群の表現論が様々な物理の理解に役立ってきたということを指摘しておく．興味のある読者は文献2)を参照されたい．

3. フーリエ変換と逆格子——双対性

結晶構造は具体的にはX線や中性子線を用いた回折実験によって決定される．その背後にはフーリエ変換という美しい数学構造があり，格子の存在が**ブラッグ散乱**という特徴的な結果を生み出す．

波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ をもつ入射波，すなわち $\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ で空間振動する波が波数ベクトル $\boldsymbol{k}'$ に散乱される強度は基本的に以下のようになる[1)*6)]．

$$I(\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}')\propto\left|\int d\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}\right|^2. \quad (2)$$

上式の絶対値の中身が原子密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ のフーリエ変換になっていることに注目してほしい．

局所密度は格子構造を反映して3次元周期性

*5) 一方，回転対称性が破れても必ずしも並進対称性が破れるとは限らない．液晶のネマティック相においては，高分子の配向が整列しているため回転対称性は破れているが，位置自由度については液体状態であり並進対称性を保っている．

*6) X線の場合は ρ は電荷密度，中性子核散乱の場合は原子核密度と読み替えるが，以下の議論は本質的に同じである．

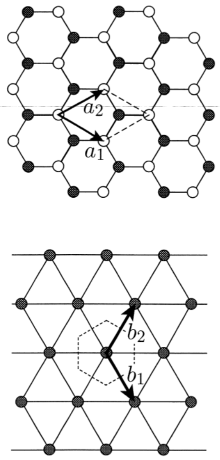


図 2　（上図）2 次元ハニカム格子と基本並進ベクトル．基本並進ベクトルで作られる単位胞は原子 2 個を含む．（下図）ハニカム格子の逆格子と基本逆格子ベクトル．点線で示したのが第 1 ブルリアン域．

$\rho(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_i)=\rho(\boldsymbol{r})$ $(i=1,2,3)$ を持つ関数である．1 次元の周期関数 $f(x+a)=f(x)$ をフーリエ変換すると，基本波数 $Q=2\pi/a$ の高調波 e^{iQnx} (n: 整数) の成分しか出てこないことを思い出してほしい．3 次元であることと基本並進ベクトルが必ずしも互いに直交しないことが結果を少しだけ複雑にするが，やはり $\rho(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{G}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}}\rho_{\boldsymbol{G}}$ と離散的なフーリエ成分の和となる．$\boldsymbol{G}$ の和は 3 つの波数ベクトルによって生成される波数空間の格子点

$$L_G=\{n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2+n_3\boldsymbol{b}_3|n_i \text{ はすべて整数}\} \quad (3)$$

について取る．3 つの $\boldsymbol{b}_i$ は基本並進ベクトルと双直交性 $\boldsymbol{b}_i\cdot\boldsymbol{a}_j=2\pi\delta_{ij}$ を持つものとして定義され，**基本逆格子ベクトル**と呼ばれる．これらによって張られる，L_G を**逆格子**と呼ぶ[*7]．図 2 に格子と逆格子の例を示す．分かりやすくするために 2 次元の例を示しているが，3 次元でも本質的に同じである．

離散的なフーリエ成分しか含まないということを反映して，散乱実験においては入射波の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}$ とすると，散乱波の波数ベクトルが $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}$ となる方向にしか散乱が起こらない．例えば写真乾板を用いて散乱 X 線の検出を行うと，感光した点がポツポツと対称性をもって散らばって見えるのがこのことを反映している．X 線散乱実験はブラッグ父子によって最初に行われたが，この散乱条件はブラッグの式と呼ばれている．この散乱データを用いて，結晶の点群や空間群を決定することができる．

なお，波数空間における単位胞に対応するのが，ブルリアン域であり特に原点を含むものを**第 1 ブルリアン域**と呼ぶ[*8]．数学的には，逆格子ベクトル分ずらすことを同値関係とみなしたときの同値類が第 1 ブルリアン域に対応する．$\mathrm{BZ}_1=\mathbb{R}^3/L_G$．

完全並進対称性を持つ系においては波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ は良い量子数であり粒子の運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ に対応するが[*9]，結晶中においてはこの役割を果たすのは第 1 ブルリアン域の波数ベクトルに限られる．このときの $\hbar\boldsymbol{k}$ を結晶運動量と呼ぶが，定数因子を省略して $\boldsymbol{k}$ を結晶運動量と呼ぶことも多い．言い換えると，結晶格子と同じ周期性をもつ演算子 $\hat{A}(\boldsymbol{r})$ をフーリエ成分 $\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ に作用させたとき，もとの $\mathbb{R}^3$ の要素として波数ベクトルは保存しないが，剰余類 BZ_1 としては保存するということである．

4. 結晶中の電子——格子とバンド

結晶中でイオンが格子を組んでいるという性質は，その中の電子の運動に大きな影響を及ぼす．ここでは後の議論でも必要となる最も大事な結論であるブロッホの定理とバンドについてのみ触れることにする．詳細は文献 1,3) を参照されたい．

結晶中の電子の運動を考えるのに，イオンおよび他の電子からのクーロン相互作用を時間に依存しない有効ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ で表す一体近似を**バンド理論**と呼ぶ．このとき，個別の電子のエネ

*7)　基本ベクトル $\boldsymbol{a}_i$ や $\boldsymbol{b}_j$ の選び方には任意性があるが，格子 L_T，逆格子 L_G は一意的に決まる．

*8)　波数空間を，最も近い逆格子ベクトル $\boldsymbol{G}$ を共有する領域毎に分割したのがブルリアン域であり，数学でいうボロノイ分割に対応する．

*9)　$\hbar\equiv$ (プランク定数)$/2\pi$．

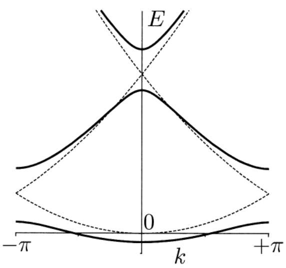


図3　1次元系のエネルギーバンド．周期ポテンシャルによってエネルギーギャップが現れる．点線は格子がないときのエネルギー分散を第1ブルリアン域で示したもの．

ルギーと波動関数はシュレジンガー方程式から求められる．

$$\mathcal{H}\psi(\boldsymbol{r})=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}). \quad (4)$$

結晶中にあるという性質はポテンシャルが格子と同じ周期性をもつことに反映されている．$V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_i)=V(\boldsymbol{r})$．このために，群 G_T の任意の要素の並進操作 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}$ とハミルトニアン $\mathcal{H}$ は交換可能である．その結果，$\mathcal{H}$ の固有関数は $\mathcal{T}_{\boldsymbol{R}}$ の固有関数にもなり次の形を取る．

$$\psi(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \quad (5)$$

ただし $u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ は結晶と同じ周期性を持ち，波数ベクトルは第1ブルリアン域に制限されている．これが**ブロッホの定理**である．これは，第3節で説明した結晶運動量の保存則からも明らかであろう．量子数として結晶運動量 $\boldsymbol{k}$ を固定しても，固有状態は可算無限個現れ，それらを区別する添字の n はバンド・インデクスと呼ばれるが，逆格子ベクトルの自由度に対応するものである．

バンド理論が重要なのは，物質が金属になるか絶縁体，半導体になるかを簡明に説明することができるからである．1次元のバンドの例を図3に示すが，大事なポイントはエネルギーギャップが現れることである．フェルミエネルギーがバンドギャップ中にあると絶縁体になり，バンドの中にあると金属となる．エネルギーギャップの現れ方は，結晶の対称性によって定性的には決まっており，ここでも点群・結晶群の重要性が明らかとなる．

5. 運動量保存則とウムクラップ過程――電気抵抗とモット絶縁体

第3節の最後で，結晶のように離散的な並進対称性しかもたない系においては，保存量は運動量ではなく結晶運動量となることを述べた．この結果として現れる物理現象を2つ紹介する．

まず**電気抵抗**について述べる．金属に電場をかけると，電場によって電子が受ける力と電子が散乱される効果が釣り合って電場に比例する定常電流が流れ続けるというのがオームの法則である．電子を散乱する機構には様々なものがあるが，代表的なものは不純物による散乱，格子振動による散乱，**電子間の散乱**の3つである．結晶の純度が高いと不純物散乱の寄与は小さいし，非常に低温においては格子振動も抑制されるのでそれによる電気抵抗も急激に小さくなる．それでは電子間散乱が低温の電気抵抗の主たる原因かというと，そう話は単純ではない．

話を簡単にするために，電場がないときに電子間散乱により電流が減衰するかどうか考えよう．普通の考え方だと，電子どうしが衝突したときでも全運動量 $\boldsymbol{P}$ は常に保存する．電子の電荷と質量を $-e$, m とすると，全電流は $\boldsymbol{J}=-e\sum$(各電子の速度) $=-e\sum_j \boldsymbol{p}_j/m=(-e/m)\boldsymbol{P}$ なので，全運動量が保存している限り全電流は減衰しないので，電子間散乱は電気抵抗の原因とはなり得ない．

格子の存在を考慮に入れると話がかわる．運動量の替わりに結晶運動量を考えるので，散乱に際して逆格子ベクトル分の変化があることが許される．

$$\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2 \to \boldsymbol{k}'_1+\boldsymbol{k}'_2+\boldsymbol{G}. \tag{6}$$

この結晶運動量の変化がある（$\boldsymbol{G}\neq\boldsymbol{0}$）過程を**ウムクラップ散乱**[4]と呼ぶ（図4）．ウムクラップ散乱を通じて全結晶運動量は減衰することが可能で，これが電気抵抗の原因の1つとなる．電子系の結晶運動量の変化分 $\boldsymbol{G}$ は，実際にはイオンの作る結晶格子の重心運動から移行している．特にこの効果が大きくなるのは，フェルミエネルギー近傍の電子どうしがウムクラップ散乱を起こすときであり，フェルミ面の差渡しが基本逆格子ベクトルの半分程度となっている場合に対応する．典型的な例は，結晶構造が単純立方格子や，より一般的に d 次元超立方格子で，各原子が価電子1個を持つ場合（ハーフフィリング）である．

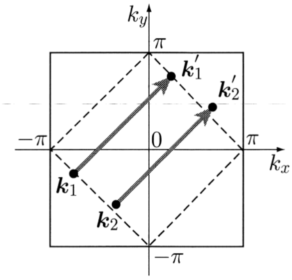


図4　2次元正方格子のウムクラップ散乱の例．運動量変化 $\boldsymbol{G}=-(2\pi,2\pi)$．点線はハーフフィリングの場合のフェルミ面．

ウムクラップ散乱が重要となる他の例として，**モット絶縁体**がある．バンド理論では，フェルミエネルギー付近のバンドがお互いに重なっていない場合には，結晶の単位胞当りの価電子数によって金属になるか絶縁体になるかが決まる．電子数が偶数のときには価電子バンドがすべて詰まって絶縁体となり，奇数のときには価電子バンドが半分だけ詰まって金属となる．英国の理論家モットは固体水素に十分高い圧力をかけると金属になることを予言したが，圧力がそこまで高くないときに絶縁体である原因が電子間クーロン斥力であることを議論した*10)．

このような状況を議論するには，いわゆるタイトバインディング模型[1]を用いるのが便利である．ブルリアン域には無限本のバンドが現れるが，その中でフェルミエネルギーにかかっているか，あるいは最も近いバンド1つのみを考える．これは各原子当り価電子の軌道として1つのみを考えることと同じである．バンドのエネルギー分散は，原子間の電子のホッピングによって記述され，ホッ

*10)　通常の固体水素は水素分子 H_2 が結晶を作っているので単位胞当りの価電子は2個となりバンド理論の絶縁体となるが，ここでは高圧下で分子が解離して水素原子が結晶を作っている状況を考えている．

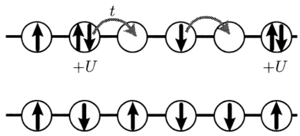


図 5 （上図）ハバード模型の金属状態のスナップショット．（下図）モット絶縁体状態．

ピングの確率振幅 t はエネルギーバンド幅に比例するパラメータとして決められる．一方，同一原子軌道に異なるスピンをもつ電子が 2 個同時に来ると，その間のクーロン斥力によりエネルギーが上昇するが，このエネルギーを U とする．このタイトバインディング模型に原子内クーロン相互作用 U を組み合わせたモデルを**ハバード模型**と呼ぶ[5)]（図 5）．これは，物性物理における格子フェルミオン模型であり，バンド理論を超えて固体中のクーロン相互作用する多電子問題を考える際の最も単純かつ普遍的なモデルである．

電子数が原子当り 1 個のハーフフィリングの場合を考える．クーロン斥力が圧倒的に強い領域 $U \gg t$ においては，すべての原子が電子 1 個によって占有され，電子が違う原子にホップするとエネルギー U を損するので動けなくなる．このような状態を**モット絶縁体**と呼ぶ（図 5 下）．平均電子数が 1 からずれると，空の配置あるいは電子が 2 個占有した配置が電子のホッピングによって，エネルギー損を伴わずに結晶中を伝搬することができるので，金属になる．このように，モット絶縁体状態の実現には強いクーロン斥力に加えて格子の存在が不可欠である．

ハーフフィリングのときには，クーロン斥力 U が十分強ければ結晶格子の形に依らずに普遍的にモット絶縁体状態になるが，前述の超立方格子一般ではすべての $U > 0$ で絶縁体の基底状態となる．

モット絶縁体の安定性は，U が大きな領域で局所原子配置のエネルギーバランスにより理解できるが，U が小さい領域ではウムクラップ散乱が本質的な役割を果たしている．特に 1 次元系の場合には，ボゾン化に基づく繰り込み群理論が成功を収め，ハーフフィリングのときにウムクラップ散乱が低エネルギーで発散的増大をすることが示されている．このことは，モット絶縁体状態の出現に格子の存在が不可欠であることの 1 つの証拠である．

6. 相転移の普遍クラスと格子

最後に少し視点を変えて**相転移**，**臨界現象**における格子の役割について述べる．臨界現象においては，秩序変数の揺らぎの長さのスケールである相関長 ξ が臨界点に近づくにつれて発散する．相転移の**普遍クラス**は，秩序変数の内部対称性と空間次元のみによって完全に決定され，格子の形などの微視的情報は普遍クラスの決定には関係ないことになっている．例えば 2 次元正方格子と三角格子のイジング模型を比較すると転移温度は異なるものの，すべての臨界指数が一致する．それではなぜ格子のことを気にする必要があるのだろうか．

答えは格子が異なると秩序変数が変わる可能性があるからである．スピン模型の場合で相互作用が強磁性的である場合には上記一般論は全く正しいが，反強磁性体であると必ずしも正しくない．正方格子であればスピンが交互に反平行に配列するネール秩序が現れるが，これは秩序変数の空間パターンが波数 (π,π) で変調されていることを除けば，強磁性秩序と同じである．一方，三角格子の場合には波数 $(4\pi/3, 0)$ と $(2\pi/3, 2\pi/\sqrt{3})$ の 2 種類の秩序の可能性があり，スピン空間の対称性の破れに加えて格子の回転対称性が同時に破れることもあり，普遍クラスは違ったものとなる．違う例を挙げると，三角格子上の反強磁性 XY スピン系では 120 度スピン秩序が現れるが，スピン配置が右回りか左回りかというカイラリティ自由度（図 6）がスピン秩序と独立に相転移をする可能性が指摘されている．カイラリティの秩序変数は隣接するスピン対について $\langle S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x \rangle$ で定義される高次自由度である．

一般に相互作用が競合する**フラストレーション**[6)]のある状況においては，どのような自由度が最終的に長距離秩序するのかが自明でない．格子の形を含めた微視的模型の詳細が重要になり，非自明

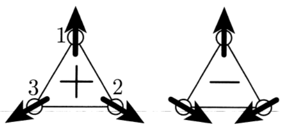


図6　2種類のカイラリティ．1-2-3の順で場所を巡るとき，スピンが右回りか左回りになるかで区別される．

な秩序もしばしば現れる．同じ空間次元でも格子によって現れる物理が異なることが興味深く，現在活発に研究されている．

7. 最後に

物性物理に現れる格子という概念の重要性をいくつかの例を中心に紹介した．今回紹介できなかった話題の中で重要なものをいくつか挙げる．まず，格子自体の量子ダイナミックスは**フォノン**[4]という概念を中心とする大きな分野である．また，電子間相互作用により価電子の並進対称性が破れる電荷密度波やスピン密度波は，フェイゾンと呼ばれる素励起や整合・不整合転移というユニークなタイプの相転移も関係している．さらには第2種超伝導体に外部から磁場が侵入して形成されるアブリコソフ格子は，超伝導の秩序変数の空間変調と関連した興味深い問題である．また2次元格子系の安定性はコステリッツ・サウレス転移と呼ばれるトポロジカル相転移に関係した深い物理を持っている．

参考文献

1) キッテル，『キッテル固体物理学入門』，丸善 (2005).
2) 犬井鉄郎，田辺行人，小野寺嘉孝，『応用群論』，裳華房 (1983).
3) W.A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Dover (1989).
4) J.M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press (1960).
5) P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific (1999).
6) Lacroix 他編, *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, Springer (2011).

（つねつぐ・ひろかず，東京大学物性研究所）

素粒子物理学と格子上の場の理論

青木 慎也

1. はじめに

素粒子物理学で使われる理論形式は，（相対論的）**場の量子論**（簡単に，**場の理論**と呼ぶこともある）である．場の理論は20世紀の物理学の二大革命である相対性理論と量子力学が融合した理論である．しかしながら，場の理論は，そのままでは数学的にきちっと定義された理論にはなっていない．後で詳しく述べるが，場の理論は形式的には，非可算無限自由度の量子力学に等価であるため，その非可算無限の自由度の多さから発散（無限大）が現れてしまい，理論が病的なものになってしまうからだ．この困難を克服し，場の量子論を数学的に厳密に定式化するために導入されたのが，**格子上の場の理論**である．本記事では，格子上の場の理論の必要性や有用性と，そこに現れる格子空間の役割について解説していきたい．

2. 場の量子論とその困難

2.1 量子力学と場の量子論

場の量子論を説明する前に，簡単に量子力学の復習をしておこう．N 個の粒子の古典力学のハミルトニアン（エネルギーに相当する物理量）は，

$$H = \sum_{n=1}^{3N} \frac{1}{2m} p_n(t)^2 + V(\{x(t)\}) \qquad (1)$$

となる．ここで，$\{x(t)\} = \{x_1(t), x_2(t), \cdots, x_{3N}(t)\}$ は座標変数，$p_n(t) = m\dot{x}_n(t)$ は運動量，m は粒子の質量である（$\dot{f}$ は時間微分を意味する）．ハミルトニアンの第1項は運動エネルギー，第2項はポテンシャル・エネルギーを表している．この理論の量子化は，座標と運動量に不確定性関係 $[x_n, p_k] = i\hbar\delta_{nk}$ を設定することから始まる．この不確定性関係は $p_n \to \frac{\hbar\partial}{i\partial x_n}$ という置き換えにより満たされる．式 (1) のハミルトニアンに対してこの p_n の置き換えを行うことで，シュレディンガー方程式

$$H\psi(\{x\}) = E\psi(\{x\}) \qquad (2)$$

が導出される．ここで $\psi(\{x\})$ は波動関数であり，その絶対値の二乗が粒子の存在確率密度を与える．シュレディンガー方程式を解き，その固有値 E を求めることで量子化されたエネルギー準位が計算される．

場の量子論は，離散的な自由度 n を持つ座標変数 $x_n(t)$ を非可算無限の自由度 y を持つ**場の変数** $\phi(y,t)$ に置き換えたもので，**非可算無限自由度の量子力学**に等価である．ここで，$x \leftrightarrow \phi$, $n \leftrightarrow y$ という対応関係があることに注意してほしい．電磁場のように空間に対して定義された量である $\phi(y,t)$ に対する量子力学なので，場の量子論と呼ばれている．

2.2 発散の困難

場の理論では，N 粒子の量子力学と違って，粒子の数が変化する．つまり，1つの粒子が2つの

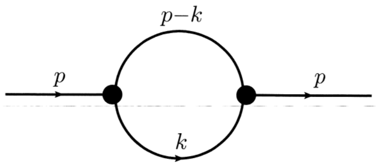


図 1　1 粒子が 2 粒子に分かれ，再び 1 粒子に戻る仮想的な過程．時間は左から右に流れていると考えている．

粒子に分裂したり，2 つの粒子が合体して 1 つの粒子になったりするのだ．このような粒子の生成消滅は，実際に実験で観測されるが，実験で観測されない**仮想的な粒子**の生成消滅も存在する．例えば，図 1 にあるように，1 つの粒子が 2 つの粒子に分かれ，しばらくたってから 2 つの粒子が合体し 1 つの粒子に戻るような過程を考えよう．我々がこの粒子を観測していたとすると，粒子が 2 つに分かれたところを見ているわけではないので，1 つの粒子が飛んでいるのを見ていることになる（“見る” というのは，光子などを粒子にぶつけてその跳ね返りを観測することである）．このような仮想的な粒子の生成消滅の寄与を “計算” してみよう．1 つの粒子が飛ぶ線は粒子の**伝搬関数**と呼ばれ，天下りであるが，その寄与はスピンを持たない場合は，$(p^2+m^2)^{-1}$ で与えられる．ここで，p は粒子の 4 次元運動量で，$p=(p_0,\vec{p})$, p_0 はエネルギー，$\vec{p}$ は通常の 3 次元運動量であり，4 次元的なベクトルの相対論的な長さは，$p^2=p_0^2-\vec{p}^2$ と定義される．実際に観測される粒子は $p_0^2=m^2+\vec{p}^2$ というアインシュタインの関係式（質量殻条件とも呼ばれる）を満たすので伝搬関数の極に対応する．一方，観測されない仮想的な粒子の場合はこの条件を満たさなくても良いので，伝搬関数は有限の値を持つ．粒子が生成したり消滅したりする部分は，**相互作用の頂点**と呼ばれる．図 1 の場合は，頂点に 3 つの線（粒子）が集まっているので，3 点相互作用の頂点と呼ばれる．頂点では，4 次元運動量は保存するので，図 1 では，1 粒子のときの 4 次元運動量を p とすると，2 粒子に分かれたときは，1 つの粒子の運動量を k とすれば，もう 1 つは $p-k$ になる．

この図の中で仮想的な 2 粒子状態の寄与（これを**自己相互作用部分** $\Sigma(p)$ と書く）は，伝搬関数や相互作用の強さを表す**結合定数**（ここでは λ と書く）を使って，（これも天下りであるが）大雑把に以下のように与えられる．

$$\Sigma(p)\propto\lambda^2\frac{1}{k^2+m^2}\frac{1}{(p-k)^2+m^2}.$$

k の値は勝手に取れるので，量子力学の重ね合わせの原理から，いろいろな k に関して足し合わせなければならない．k は連続変数なので足し合わせは積分となり

$$\Sigma(p)\propto\lambda^2\int d^4k\frac{1}{k^2+m^2}\frac{1}{(p-k)^2+m^2}$$

となる．実はこの積分は，k の値が大きいところの寄与のために発散してしまう．k が大きいと分母の p や m は無視できるので，積分の寄与は

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\int^{\Lambda}\frac{k^3dk}{k^4}=\lim_{\Lambda\to\infty}\log\Lambda$$

となり，対数的に発散している．ここで，Λ は積分の値を有限に計算するために人為的に導入された運動量 k の上限値（**cut-off**）であり，計算の最後で無限大の極限を取る．このように，場の理論においては，仮想的な粒子は運動量の大きな部分の寄与のために発散を与えることがある．運動量の大きな部分は紫外領域（波数が大きい領域）なので，この発散は**紫外発散**と呼ばれている．

仮想粒子による自己相互作用部分は，古典的な粒子の伝搬に対する（場の理論からの）**量子補正**に対応するので，それが発散するということは，量子補正が無限大となることで，理論として意味をなさない．この困難を解決するために考えられたのが**繰り込み理論**である．**繰り込み**とは，理論のパラメタ，例えば，粒子の質量，を**観測値**と**相殺項**とに分け，量子補正による発散を相殺項により打ち消す操作である．模式的に書くと，理論の質量 + 量子補正 =（観測される質量 + 相殺項）+ 量子補正 = 観測される質量 となる．つまり，我々が観測する粒子の質量は量子補正込みのものであり，その値は実験で測られるのでもちろん有限で

あるが，もともと理論に入っていた質量パラメタは量子補正を打ち消すような無限大を含んでいた，と考えるのである．繰り込み理論により場の理論は予言可能になり，素粒子の性質を記述する理論として成功をおさめた．

3. 格子による場の理論の厳密な定式化

無限大の相殺項による無限大の量子補正の相殺という繰り込み理論の方法は，とってつけたようなやり方であり，また，相互作用のない**自由場の理論**に対して相互作用の効果を結合定数の展開で取り入れていくという**摂動展開**に依存した方法である．結合定数が強くなり摂動展開が使えないときに場の理論をどのように定式化し，また，具体的にどうやって計算するか，など多くの問題が残ってしまう．ここでは，それらの問題に答える方法として提案された格子を用いた場の理論の定式化について紹介する．

3.1 格子正則化：理論の有限化

繰り込み理論では発散の相殺を用いたが，発散の相殺を議論するには，発散がどのように振る舞うかきちんと定義する必要がある．例えば，発散A/発散Bという比が，ゼロなのか，無限大なのか，有限な値なのか，ということは，共通の尺度を使って発散の様子を調べないと分からない．自己相互作用の計算では，運動量積分の上限値として cut-off Λ を導入して発散する積分をいったん有限の値にした．このような操作を理論の**正則化**と呼ぶ．このように，繰り込みの前に正則化をすることが必須であり，通常は摂動展開に現れる積分を有限にする正則化が導入される．しかし，摂動展開なしで場の理論を定義するためには，正則化も摂動展開に依ってはいけない．

格子による正則化は，場の理論を連続時空ではなく離散的な格子点上に定義することで実現される．2次元（正方）格子の例を図2に載せる．4次元の格子点は整数ベクトル $n = (n_0, n_1, n_2, n_3)$ を用いて，$x = na$ で与えられる．a は格子点の間の距離を表す量であり，**格子間隔**と呼ばれている（通常の場の理論は**ミンコフスキー空間**，**ユークリッド空間**のどちらでもで定義可能であるが，格子上の場の理論の場合は，ユークリッド空間を考える）．格子上の場の理論に発散が出ないことを簡単に見るために1次元の例を考えよう．連続空間上の関数 $f(x)$ はそのフーリエ変換 $F(p)$ により

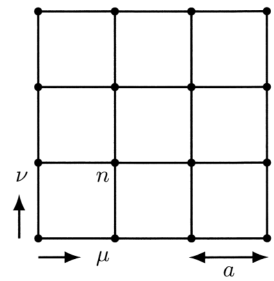


図2　(2次元)格子の模式図．a は格子間隔である．

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} F(p) e^{ipx}$$

と p の積分で表せる．同様に，格子点上で定義される関数 $f_L(x = na)$ の場合は，そのフーリエ変換 $F_L(p)$ によって

$$f_L(x) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} F_L(p) e^{ipx}$$

となる．連続時空では運動量の範囲が $-\infty < p < \infty$ であったのが，格子空間上で考えると $-\pi/a < p < \pi/a$ となり，自然に cut-off π/a が導入されたことに注目してほしい．そのおかげで，紫外発散は存在せず，理論が正則化されたことが分かる．物理的には，格子空間上では a より小さい距離が存在しないので，それに対応する高運動量成分も存在しない，ということを意味している．もちろん，$a \to 0$ という極限を考えると，cut-off が無限大になり，元の連続空間での積分に戻る．

ここで注意してほしいのは，格子上の場の理論と，前節で紹介した（連続時空の）場の理論とでは，その量子力学の構造が異なっていることだ．場の理論は非可算無限自由度の量子力学と等価である，と述べたが，格子上の場の理論は，自由度の添字 $x = na$ が離散的であるため，**可算自由度の量子**

力学になっている．特に，体積が $V = L^4$ と有限である場合，連続時空の場の理論であればやはり非可算無限自由度であるが，格子上の場の理論は，有限自由度（その数は $(L/a)^4$）の量子力学に等価である．ここで，$a \to 0$ の極限を取ると無限自由度になるが，それでも可算無限である．つまり，格子上の場の理論は，有限自由度の量子力学の可算無限自由度の極限として，場の理論を「定義」したことになっている．前に述べた「場の量子論は非可算無限自由度の量子力学と等価である」というのは，この意味では正しくなかったわけだ．格子上の場の理論により，場の理論が数学的により厳密に定義され，その取扱いが容易になった．

3.2 スカラー場の理論

格子上の場の理論の例として，**スカラー場の理論**を紹介する．

連続時空のスカラー場の理論の**作用**（運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差）は，天下りだが，以下で与えられる．

$$S(\phi) = \int d^4x \Big[-\sum_{\mu=0}^{3} \phi(x) \frac{\partial^2 \phi(x)}{2\partial x_\mu^2} + \frac{m^2}{2}\phi(x)^2 - V(\phi(x)) \Big].$$

ここで，$\phi(x)$ はスカラー場であり，初めの 2 項が相対論的な自由場の運動項，V がポテンシャル項，m はスカラー粒子の質量，である．S はスカラー場の関数 ϕ を 1 つ与えると，値が決まるので，**汎関数**（関数の関数）と呼ばれている．前に座標と運動量の不確定性関係が量子化であると述べたが，ここでは，**経路積分**という別の方法での量子化を考えよう．経路積分量子化では，以下のような“積分”が重要になる．

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \, e^{-S(\phi)}.$$

ここで，$\mathcal{D}\phi$ が経路積分であり，すべて取りうるスカラー場 $\phi(x)$ に関する和を取ることを意味する．$S(\phi)$ が ϕ の汎関数なので，ϕ を通常の x と思えば，通常の積分と同じ形をしている．つまり，経路積分は，汎関数の関数による積分になっている．

このスカラー場の理論を格子上に定義することを考えよう．まず，作用 S を**格子化**する．難しいのは，微分を含む第 1 項であるが，2 階微分 $\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_\mu^2}$ の代わりに，以下で定義される対称 2 階差分

$$\nabla_\mu^2 \phi(x = na) = \frac{\phi(na + \hat{\mu}a) + \phi(na - \hat{\mu}a) - 2\phi(na)}{a^2}$$

を用いれば良い．ここで，$\hat{\mu}$ は μ 方向の単位ベクトルである．関数のテイラー展開 $f(x + a) = f(x) + af^{(1)}(x) + a^2 f^{(2)}(x)/2 + \cdots$ を用いれば（ここで $f^{(n)}$ は n 階微分を表す），

$$\nabla_\mu^2 \phi(x = na) = \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_\mu^2} + O(a^2)$$

なので，$a \to 0$ の極限で 2 階微分に一致する．これを用いると，格子上の作用は

$$S_L = a^4 \sum_n \Big[-\sum_{\mu=0}^{3} \phi(na) \frac{\nabla_\mu^2 \phi(x = na)}{2} + \frac{m^2}{2}\phi(na)^2 - V(\phi(na)) \Big]$$

となる．添字の L は格子（Lattice）の頭文字を意味している．ここでは，積分 $\int d^4x$ が $a^4 \sum_n$ という格子点の和になっている（次元を合わせるために a^4 が付くことに注意）．格子上での経路積分は

$$Z_L = \prod_n \int d\phi(na) \, e^{-S_L}$$

となり，経路積分は各格子点での多重積分で表された．

4. 格子上の場の理論の連続極限

もちろん，我々の時空間は連続であると考えるので，格子は実存の物ではない．したがって，$a \to 0$ の**連続極限**を取り，格子構造を見えなくする必要がある（このことは，格子理論を正則化の 1 つと考えた場合，その cut-off が無限大の極限を取ることに相当する）．スカラー場のところで見たように，作用の段階で $a \to 0$ の連続極限を取れば，連続

理論の作用に一致する．つまり，$\lim_{a\to 0} S_L = S$ である．しかしながら，この場合は，経路積分の効果を考えていないので，あくまで古典論での一致にしかすぎない（経路積分は量子化であり，その寄与は量子効果を表している）．この節では，量子効果（経路積分）を取り入れた上でどのように連続極限を取れば良いかを議論する．

4.1 格子作用の無次元化と統計力学

まず，無次元の場と質量を以下のように定義する．

$$\varphi_n = a\phi(na), \quad M^2 = (ma)^2 + 4.$$

また，説明を簡単にするために $V(\phi) = -\lambda\phi^4$ と 4 点相互作用のみを考える．これらを使うと，格子作用は

$$S_L = -\sum_{n,\mu} \varphi_n \varphi_{n+\mu} + \sum_n \left(M^2\varphi_n^2 + \lambda\varphi_n^4\right)$$

と無次元化される．経路積分も定数倍を除けば

$$Z_L = \prod_n \int d\varphi_n e^{-v_n + \sum_\mu \varphi_n\varphi_{n+\mu}},$$
$$v_n \equiv M^2\varphi_n^2 + \lambda\varphi_n^4$$

とすべて無次元の量で書かれる．この形は，**隣接相互作用**する古典**スピン系**の**分配関数**（partition function）と同じ形をしている．この理論はすべて無次元量で書かれており，どこにも格子間隔 a は出てこない．それでは，どうやって $a \to 0$ の極限を取れば良いのだろうか？

4.2 連続極限と 2 次相転移

無次元の理論での連続極限の取り方を説明するために，スカラー場の **2 点関数**と呼ばれる量を

$$F^{(2)}(t-s) = \frac{1}{Z_L}\prod_n \int d\varphi_n e^{-S_L}\varphi_s\varphi_t$$

で定義する．これは，格子点 s で生成されたスカラー粒子が格子空間を伝搬していき，格子点 t で消滅するという物理過程の確率振幅を表している．この量は，$|s-t|$ が充分大きければ，スカラー粒子の繰り込まれた（量子効果をすべて取り入れた）質量 m_r を使って，

$$F^{(2)}(t-s) \propto e^{-m_r a|t-s|}$$

と書ける．つまり，粒子の伝搬のしやすさが粒子の質量を決めているわけだ（質量が小さいと振幅が大きく，より伝搬しやすいことを意味する）．一方，スピン系では，この量は**スピン相関関数**なので，

$$F^{(2)}(t-s) \propto e^{-|t-s|/\xi}$$

と振る舞う．ここで，ξ は**相関距離**と呼ばれる量で，スピンどうしが相互作用を及ぼし合う（相関する）目安の距離を与えている（作用には隣接相互作用しかないが，それが次々と伝搬してスピンの長距離の相関が可能になる）．両者を比較すると

$$\xi = \frac{1}{m_r a} \tag{3}$$

という関係が分かる．ここで，繰り込まれた粒子の質量が有限になる（発散しない）ように $a \to 0$ の極限を考えよう．このとき，式 (3) から相関距離 ξ は発散することが必要である．相関距離が発散するということは，スピン系が 2 次（以上の）相転移を起こしていることを意味している．つまり，格子上の場の理論で連続極限を取るには，格子理論をスピン系（より一般には**統計系**）と見なして，その系のパラメタ（今の場合は M と λ）を調整して，**2 次相転移**点に近づけていけば良い．相関距離と粒子の繰り込まれた質量を使って，格子間隔は $a = 1/(\xi m_r)$ と与えられる．

この見方をさらに進めると，繰り込みというのは，「理論の作用に現れるパラメタを調整して 2 次相転移点に近づけることによって，粒子の質量など観測で測られる物理量を有限にする操作である」と言うことができる．$m_r = 1/\xi a$ という関係があるので，パラメタを調節せずに $\xi \neq 0$ のままで $a \to 0$ としてしまうと，m_r が発散してしまう．また，もし，統計系に 2 次相転移が存在しなければ，連続極限を取ることができないので，対応する連続時空の場の理論は存在しないことになる．この場合は，理論が**繰り込み不可能**であると言う．連続な場の理論の摂動展開では**繰り込み可能**な理論だけを考えるが，格子上の場の理論では，連続極限を取ることができる場合のみに意味がある．そして，連続極限が自由場でない（相互作用を持っている）場合を，繰り込み可能であると呼ぶ．この繰り込み可能の定義は，摂動展開に拠っていないので，より普遍的な概念になっている．

4.3 場の理論のユニバーサリティ（普遍性）

すべての場の理論が，格子上の場の理論の連続極限で得られると仮定しよう．その場合は，対応する統計系の 2 次相転移点を調べることで，場の理論の性質を知ることができる．そして，すべての統計系とその**相転移現象**を分類することができれば，場の理論の分類をすることが可能になる．

統計系の相転移は，**繰り込み群**の**固定点**に関係するので，固定点の性質を分類できれば，相転移現象の分類ができる．繰り込み群の固定点の性質は相互作用の詳細に拠らず次元や**対称性**のみで決まる，という**ユニバーサリティ（普遍性）**が信じられている．もし，このユニバーサリティの考えが正しいとすると，いろいろな場の理論の性質は，相互作用の詳細に拠らずに，次元や対称性のみで決まる，ということが言える．つまり，場の理論のユニバーサリティである．

スカラー場を例にユニバーサリティを考えてみよう．スカラー理論のポテンシャルとして 4 点ではなく 6 点相互作用 $\lambda_6\phi^6$ を考えると，λ_6 が次元を持つため，摂動展開では繰り込み不可能な理論となる．格子理論の立場では，6 点相互作用は，$\sum_n \varphi_n^6 \to \int d^4x\, a^2 \phi(x)^6$ なので，連続極限でゼロになってしまうと考えるのだ．つまり，格子作用として $\lambda_6\phi^6$ を考えても，連続極限では，量子補正によって生成される ϕ^4 のみが生き残り，$\lambda\phi^4$ を考えた場合の連続極限と同じになる．これがユニバーサリティの例であり，繰り込み可能な相互作用とは，繰り込み群の固定点で生き残る相互作用である，と言い換えられる．

4.4 連続極限と対称性の回復

連続空間と格子空間とではその対称性が異なる．例えば，連続空間は回転対称性（ミンコフスキー空間の場合はローレンツ対称性）を持つが，格子空間の場合，各軸回りの 90 度回転を組み合わせた対称性しか持たない．したがって，その空間に上に作られる場の理論が持つ対称性が異なる．しか

しながら，格子上の場の理論でも，格子間隔に比べて充分に長い距離を考えれば，回転対称性は成り立っていると考えられので，連続極限を取れば，回転対称性は回復すると期待される．

実際，有限格子間隔でのスカラー場の理論では，例えば，$\sum_{\mu} \varphi_n \nabla_{\mu}^4 \varphi_n$ という 4 階微分の項は，座標軸の 90 度回転では不変だが，空間回転では不変でない．しかし，この項は次元が 6 なので，φ_n^6 のときの議論と同じように，繰り込み不可能な項であり，連続極限を取れば消えてしまう．このように，繰り込み可能な場の理論の連続極限では，空間対称性が回復することが期待できる．

5. 最後に

ここで見てきたように，格子上の場の理論は，摂動展開に依らずに場の理論の定義を与えることができるので，素粒子の強い相互作用など，摂動展開がうまく行かない理論にも適用可能である．強い相互作用は，クォークとグルーオンの力学であり，量子色力学（QCD）で記述される．格子上に QCD を定義すること（格子 QCD）で，クォークの束縛状態であるハドロンの性質を研究することが可能になる．特に，格子上の場の理論はすべて無次元量で書けるので，計算機上に理論を入力し，数値計算をすることができる．最近では，格子 QCD の数値計算で，ハドロンの質量が計算できるだけでなく，陽子や中性子などの核子の間に働く力（核力）なども格子 QCD で計算できるようになってきた．

このような格子上の場の理論の基礎や応用に関しては，拙書で恐縮だが，大学院生向けの教科書[1)]を見ていただきたい．

参考文献

1) 青木慎也『格子上の場の理論』シュプリンガー現代物理学シリーズ 3，シュプリンガー・ジャパン．2012 年 4 月からは丸善出版株式会社より出版される．

（あおき・しんや，筑波大学大学院数理物質科学研究科）

結晶格子と離散的代数幾何学



砂田 利一

1. 序

筆者が愛でる数学の面白さは，全く異なる起源を持つ 2 つ（以上）の概念が結びつく「ダイナミズム」にある．その一つの例は，測量や天体観測から派生した三角関数と，数値計算を発端とする指数関数を複素数の世界で結びつけるオイラーの公式 $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ である．もう一つの例は，ガウス–ボンネの公式を一般化したアティヤ–シンガーの指数定理である．これは，多様体上の解析的量が位相幾何学的量と等しいことを主張している[15]．本稿は，これらの例のような「歴史的価値」を持つものでは全くないが，筆者が結晶の数学的研究の最中に発見した一つの例を提示することを目的としている．

結晶理論と言えば，結晶の対称性の記述に用いられる結晶群を思い出す人が多いだろう．本稿で筆者が意味する結晶理論は，20 世紀後半からグラフ理論を用いて研究されてきた現代結晶学（modern crystallography）である．この現代結晶学が，古典的代数幾何学の離散的類似と密接に関係することを説明したいと思うのである．

2. アーベル・ヤコビ写像

代数幾何学の起源の一つは，ファニャノとオイラーによる不定積分

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^4}}$$

の研究である（1750, 51 年）．この積分の逆関数を考え，さらに複素変数に拡張することにより，その本質的意味を見出したのがガウスであり（1797 年），彼はこれを以って 2 重周期を持つ有理型関数である楕円関数の理論の創始者となったのである[17, 18]．楕円関数論は，理論の成熟を待ってから公にしようとしたガウスのノートの中に「隠された」ままであったが，アーベル，ヤコビは，ガウスとは独立に楕円関数の研究を行い（1827, 1829 年），さらに高次の無理関数の不定積分の研究を企てた．彼らの試行錯誤は，リーマンの登場により代数曲線上の有理型関数（と有理型 1 次形式の積分）の理論として結実することとなった（1857 年）．リーマンの研究で開発された手法はポアンカレにより一般化され，20 世紀前半に厳密に定式化された被覆空間論とホモロジー論の原型にもなったことを注意しておこう．

現代的に整理された形で，アーベル，ヤコビ，リーマンの理論を説明しよう．S を複素数体 $\mathbb{C}$ 上で定義された完備な非特異代数曲線（リーマン面）とする．S 上の正則 1 次形式のなすベクトル空間を $\Omega^1(S)$ として，

$$J(S) = (\Omega^1(S))^*/H_1(S, \mathbb{Z})$$

と置く．ここで，1 次のホモロジー群 $H_1(S, \mathbb{Z})$ は，対写像

$$([\alpha], \omega) = \int_\alpha \omega$$

により，$\Omega^1(S)$ の双対空間 $(\Omega^1(S))^*$ の離散的部分群（格子）と考えている．α は S 上の 1-サイクルである．このようにして定義された $J(S)$ は複素トーラス（実際には複素射影空間の部分多様体として実現されるアーベル多様体）であり，ヤコビアンとよばれる．

アーベル・ヤコビ写像 $\Phi : S \longrightarrow J(S)$ を次のようにして定義する．

$$(\Phi(x), \omega) = \int_{x_0}^x \omega \quad (\mathrm{mod}\ H_1(S, \mathbb{Z})).$$

積分は，予め固定した点 x_0 と x を結ぶ曲線に沿って行われる．記号 “mod” は，右辺の積分 $\omega \mapsto \int_{x_0}^x \omega$ が曲線の取り方に依存はしているものの，$H_1(S, \mathbb{Z})$ を「法とすれば」一意的に決まることを意味している．

次に補助的対象として，ピカール群を定義しよう．

$$\mathrm{Div}^0(S) = \left\{ \sum_{x \in S}^{\text{有限和}} a_x x \;\middle|\; a_x \in \mathbb{Z},\ \sum_{x \in S} a_x = 0 \right\}$$

と置く（次数 0 の因子群）．そして，$P(S)$ により，S 上の有理型関数に付随する因子（主因子）からなる $\mathrm{Div}^0(S)$ の部分群とする．すなわち

$$P(S) = \left\{ \sum_{x \in S} \mathrm{ord}_x(f) x \;\middle|\; f : \text{有理型関数} \right\}$$

である（$\mathrm{ord}_x(f)$ は f の点 x における位数）．これらを用いて $\mathrm{Pic}(S) := \mathrm{Div}^0(S)/P(S)$ として定義されるのがピカール群であり，これも複素トーラスになっている．さらに写像 $\Phi' : S \longrightarrow \mathrm{Pic}(S)$ を $\Phi'(x) = [x - x_0] \in \mathrm{Div}^0(S)/P(S)$ により定義しよう．

これらの概念を用いれば，19 世紀の代数幾何学の結果は，次のアーベルの定理として集約される．

> 対応 $[x - x_0] \mapsto \Phi(x)$ は，$\mathrm{Pic}(S)$ と $J(S)$ の間の正則同型を与え，この同型により $\mathrm{Pic}(S)$ と $J(S)$ を同一視すると，アーベル・ヤコビ写像は Φ' と一致する．

3. グラフ理論におけるアーベル・ヤコビ写像

本節では，アーベルの定理のグラフ版を解説する[12]．

まず，定義と記号について述べよう．グラフとは，頂点の集合 V と，辺（有向辺）の集合 E の対として，$X = (V, E)$ と表されるものである[*1]．

$o(e) = e \in E$ の始点，$t(e) = e \in E$ の終点，

$\bar{e} = e$ とは逆の向きを持つ辺

とする．さらに $E_x = \{e \in E;\ o(e) = x\}$ と置く．E_x の元の個数は頂点 x の次数とよばれる．E の部分集合 E^0 は，$E^0 \cap \overline{E^0} = \emptyset$, $E^0 \cup \overline{E^0} = E$ を満たすとき，X の向きとよばれ，向きの与えられたグラフを有向グラフ（図 1）という．

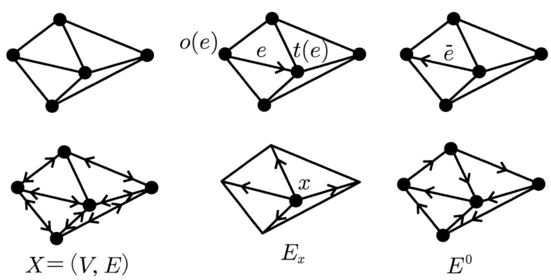


図 1　グラフ．

例　G を群，$i : A \longrightarrow G$ を $i(A)$ が G を生成するような写像としよう．まず有向グラフとして，頂点の集合を G，有向辺の集合を対 (g, a) $(g \in G, a \in A)$ の全体として，$o(g, a) = g, t(g, a) = gi(a)$ と置いて定義されるものを考える．そして，向きを忘れて得られるグラフを $X(G, i)$ と表し，**ケイリー・セール・グラフ**という．

次にグラフのホモロジー群について簡単に復習しよう．有限グラフ $X_0 = (V_0, E_0)$ に対して，$\partial : C_1(X_0, \mathbb{Z}) \to C_0(X_0, \mathbb{Z})$ を境界作用素とする．ここで

$$C_0(X_0, \mathbb{Z}) = \left\{ \sum_{x \in V_0} a_x x \;\middle|\; a_x \in \mathbb{Z} \right\},$$

*1）　辺は 2 つの向きを持ち，E はこの双方をすべて集めたものである．

$$C_1(X_0,\mathbb{Z}) = \left\{ \sum_{e\in E_0} a_e e \;\middle|\; a_e \in \mathbb{Z} \right\},$$

$$\partial(e) = t(e) - o(e)$$

とする．ただし，$C_1(X_0,\mathbb{Z})$ においては，$\overline{e} = -e$ という関係を仮定する．ホモロジー群 $H_1(X_0,\mathbb{Z})$ は

$$H_1(X_0,\mathbb{Z}) := \mathrm{Ker}\,\partial = \{\alpha \in C_1(X_0,\mathbb{Z}) \,|\, \partial\alpha = 0\}$$

により定義される．

$\mathbb{Z}$ を $\mathbb{R}$ に置き換えることにより，ベクトル空間 $H_1(X_0,\mathbb{R})$ が得られるが，$H_1(X_0,\mathbb{Z})$ は $H_1(X_0,\mathbb{R})$ の格子群になっている．

$C_1(X_0,\mathbb{R})$ の内積を

$$e \cdot e' = \begin{cases} 1 & (e = e'), \\ -1 & (e = \overline{e'}), \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

により定義し，$\boldsymbol{v} : C_1(X_0,\mathbb{R}) \to H_1(X_0,\mathbb{R})$ を直交射影とする．次の事実を確かめるのは容易である．

(1) $\boldsymbol{v}(\overline{e}) = -\boldsymbol{v}(e)$ かつ

$$\sum_{e\in E_{0x}} \boldsymbol{v}(e) = \boldsymbol{0} \quad (x \in V_0).$$

(2) すべての $\boldsymbol{x} \in H_1(X_0,\mathbb{R})$ に対して，

$$\sum_{e\in E_0} \big(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}(e)\big)\boldsymbol{v}(e) = 2\boldsymbol{x}.$$

ヤコビアンの離散類似を定義しよう．まず，$H_1(X_0,\mathbb{Z})$ は，すべての $\alpha,\beta \in H_1(X_0,\mathbb{Z})$ に対して $\alpha\cdot\beta \in \mathbb{Z}$ が成り立つという意味で $H_1(X_0,\mathbb{R})$ の整格子である．よって，双対（逆）格子

$$\begin{aligned} &H_1(X_0,\mathbb{Z})^{\#} \\ &= \{\alpha \in H_1(X_0,\mathbb{R});\ \text{すべての } \beta \in H_1(X_0,\mathbb{Z}) \\ &\qquad \text{に対して } \alpha\cdot\beta \in \mathbb{Z}\ \} \end{aligned}$$

は $H_1(X_0,\mathbb{Z})$ を含む．そこで，

$$\mathfrak{J}(X_0) = H_1(X_0,\mathbb{Z})^{\#}/H_1(X_0,\mathbb{Z})$$

と置こう．これは，平坦トーラス群 $J(X_0) = H_1(X_0,\mathbb{R})/H_1(X_0,\mathbb{Z})$ の有限部分群である．

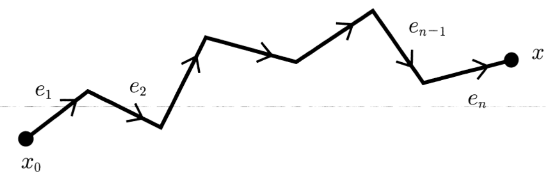


図 2　x_0 と x を結ぶ路.

位数 $|\mathfrak{J}(X_0)|$ は，X_0 を張るツリー（spanning tree）の数（tree number）$\kappa(X_0)$ に等しい[*2]．さらに，すべての $e \in E_0$ について，$\boldsymbol{v}(e) \in H_1(X,\mathbb{Z})^{\#}$ であり，$\{\boldsymbol{v}(e)\}_{e\in E_0}$ は $H_1(X,\mathbb{Z})^{\#}$ を生成する．各 $\boldsymbol{v}(e)$ を $\mathfrak{J}(X_0)$ の元と見なせば，$\{\boldsymbol{v}(e)\}_{e\in E_0^o}$ は $\mathfrak{J}(X_0)$ を生成する．ここで E_0^o は向きである．こうして，写像 $\boldsymbol{v} : E_0^o \to \mathfrak{J}(X_0)$ に付随するケイリー・セール・グラフ $X\big(\mathfrak{J}(X_0),\boldsymbol{v}\big)$ が得られる．これは向きの取り方に依らず定まり，X_0 のヤコビアンという．記号の乱用になるが，グラフとしてのヤコビアンも $\mathfrak{J}(X_0)$ で表すことにしよう．

$x_0 \in V_0$ を固定した頂点とする．写像 $\varPhi : V_0 \to \mathfrak{J}(X_0)$ を

$$\varPhi(x) = \boldsymbol{v}(e_1) + \cdots + \boldsymbol{v}(e_n) \pmod{H_1(X_0,\mathbb{Z})}$$

により定義する．ここで $c = (e_1,\ldots,e_n)$ は x_0 と x を結ぶ X_0 の路（path）とする（図 2）．この右辺は，$(e_1',\ldots,e_m')$ を x_0 と x を結ぶ別の路とするとき，α を $(e_1,\ldots,e_n,\overline{e_1'},\ldots,\overline{e_m'})$ により定義される 1 サイクルとすれば

$$\begin{aligned} &\big(\boldsymbol{v}(e_1) + \cdots + \boldsymbol{v}(e_n)\big) - \big(\boldsymbol{v}(e_1') + \cdots + \boldsymbol{v}(e_m')\big) \\ &= \boldsymbol{v}(\alpha) = \alpha \in H_1(X_0,\mathbb{Z}) \end{aligned}$$

が成り立つことから well-defined であることが分かる．$\varPhi$ は自然な方法で X_0 から $\mathfrak{J}(X_0)$ へのグラフとしての写像に拡張され，これを離散的アーベル・ヤコビ写像という[*3]．

次にピカール群の離散類似を定義するため，

---

*2)　一般にツリーはサイクルを持たないグラフを意味し，X_0 の部分グラフは，もしそれがツリーであって，さらに X_0 の頂点をすべて含むならば，「X_0 を張るツリー」とよばれる．一般に，tree number は大きな数になる．例えば完全グラフ K_n では n^{n-2} であり，ピーターセン・グラフでは 2000 である．

*3)　グラフ上の調和 1 次形式の概念を使えば，元来のアーベル・ヤコビ写像の定義に「近い」定式化が可能である．

$$\begin{aligned}&\mathrm{Div}^0(X_0)\\&=\left\{\sum_{x\in V_0}a_x x\in C_0(X_0,\mathbb{Z})\;\middle|\;\sum_{x\in V_0}a_x=0\right\},\\&P(X_0)=\partial\partial^*\big(C_0(X_0,\mathbb{Z})\big)\end{aligned}$$

と置く．ここで，∂^* は $\partial : C_1(X_0,\mathbb{R}) \to C_0(X_0,\mathbb{R})$ の随伴である．ただし $C_0(X_0,\mathbb{R})$ の内積は

$$x\cdot y=\begin{cases}1 & (x=y),\\ 0 & (x\neq y)\end{cases}$$

により定義する．このとき $\mathrm{Pic}(X_0)=\mathrm{Div}^0(X_0)/P(X_0)$ が離散的ピカール群である[*4)]．写像 $\Phi' : V_0 \longrightarrow \mathrm{Pic}(X_0)$ も，前節と全く同様に $\Phi'(x)=[x-x_0]$ と置いて定義すると，次のアーベルの定理の離散類似が成り立つ．

$\Phi=f\circ\Phi'$ が成り立つような（群としての）同型写像 $f : \mathrm{Pic}(X_0) \longrightarrow \mathfrak{J}(X_0)$ がただ一つ存在する．

注意　グラフ理論において最初にアーベル・ヤコビ写像を定式化したのは R. Bacher, P. De La Harpe, and T. Nagnibeda[1)]である（ただし，有限アーベル群としてのヤコビアンであり，上で解説した方法とは少々異なる）．これとは独立に，我々はアーベル・ヤコビ写像の類似をランダム・ウォークの研究の中で見出した[6,7)]．古典的代数幾何学におけるもう一つの代表的定理であるリーマン・ロッホの定理も，グラフ理論の中で定式化されている[2)]．

4. 位相的結晶と標準的実現

さて，これまで述べてきたことはどのようにして現代結晶理論と関係するのだろうか？ これを説明するには，図形としての結晶構造の特徴から始めなければならない．結晶は，格子群の平行移動作用に関する周期性を持つ，この格子群をブラ

*4)　$P(X_0)$ の定義において，$\partial\partial^*$ はラプラシアンの離散類似であり，一方，$\Delta\log|f|=2\pi\sum\mathrm{ord}_x(f)\delta_x$ が成り立つことを思い出せば，定義の正当性がある程度理解されるであろう（δ_x は x に台を持つディラックのデルタ関数）．

ベー（Bravais）格子という．群作用が与えられると，その軌道空間が考えられ，今の場合の軌道空間は有限グラフになる．

このような観察は結晶学者により行われ（文献3)，1984年），現代結晶学の出発点となった．数学から見れば，「図形としての結晶は，有限グラフ上のアーベル被覆である」という，至極簡単な表現になる．この事実を踏まえ，有限グラフ $X_0 = (V_0, E_0)$ 上の d 次元の**位相的結晶**（topological crystal[*5)]）を，X_0 上の正規被覆グラフ $X = (V, E)$ で，その被覆変換群 L が階数 d の自由アーベル群（$\mathbb{Z}^d$ と同型な群）となっているものとして定義する．被覆空間の一般論により，X_0 上の d 次元位相的結晶全体と，$H_1(X_0, \mathbb{Z})/H$ が階数 d の自由アーベル群であるような $H_1(X_0, \mathbb{Z})$ の部分群 H の全体との間に対応がある（$L = H_1(X_0, \mathbb{Z})/H$ は被覆変換群となっている）．この事実から，結晶の位相型に関する限り，その「数え上げ」は原理的には完全に可能になる．

しかし，位相的結晶は抽象的対象である，2次元あるいは3次元に限っても，そのままでは目に見えるものではない．そこで，位相的結晶を平面や空間に「実現」する手段が求められることになる．とは言え，実現の仕方はもちろん一意的ではないから，何らかの意味で標準的な実現を探したい[*6)]．例えば，図3はダイヤモンドの結晶構造（図4）の別の実現方法である．

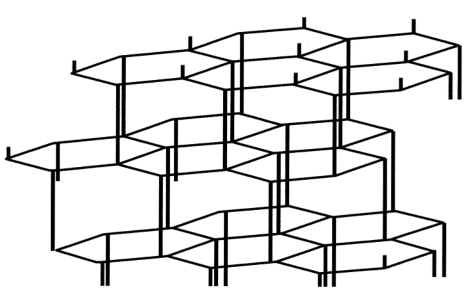


図3　ダイヤモンドのグラファイト型実現．

標準的実現の定義の前に，位相的結晶の一般の実現の定義を与えておかなければならない．X_0 上の d 次元位相的結晶 X の（周期的）実現とは，次の性質を満たすような単射準同型写像 $\rho : L \longrightarrow \mathbb{R}^d$ を有する区分的に線形な写像 $\Psi : X \longrightarrow \mathbb{R}^d$ のことである．

(1)　$\Psi(\sigma x) = \Psi(x) + \rho(\sigma) \quad (\sigma \in L)$,

(2)　$\rho(L)$ は $\mathbb{R}^d$ の格子群．

$\boldsymbol{u}(e)$ $(e \in E)$ を $\boldsymbol{u}(e) = \Psi(t(e)) - \Psi(o(e))$ により定義すると，$\boldsymbol{u}(\sigma e) = \boldsymbol{u}(e)$ であるから $\boldsymbol{u}$ は E_0 上のベクトル値関数であり，$\boldsymbol{u}(\overline{e}) = -\boldsymbol{u}(e)$ $(e \in E_0)$ を満たしている．ベクトルのシステム $\{\boldsymbol{u}(e)\}_{e \in E_0}$ は，結晶 $\Psi(X)$ を完全に決めるから，**構成要素**（building block）とよぶことにする．

さて，無限個存在する実現の中から，「特別」な実現を選び出すにはどうしたらよいだろうか．幾何学では，図形に関する最小，あるいは最大値問題を設定し，それを用いて特別な図形を特徴付けることがよく行われる．例えば，平面上の閉曲線に関する等周不等式は，周の長さ L と面積 S について $4\pi A \leq L^2$ が成り立つこと，さらに等号は円周のときのみ成り立つことを主張しているが，このことから，面積を一定にして周の長さを最小にする閉曲線は円周に限ることが結論される．言うまでもないことだが，円周はすべての閉曲線の中で最も対称性が大きい．

これを念頭に置いて，結晶理論における「最小原理」を定式化しよう[9,14)]．結晶を調和振動子系と見なし，単位胞当たりの正規化されたエネルギーを

$$E(\Psi) = \mathrm{vol}\big(D_{\rho(L)}\big)^{-2/d} \sum_{e \in E_0} \|\boldsymbol{u}(e)\|^2$$

により定義する[*7)]．ここで $\mathrm{vol}\big(D_{\rho(L)}\big)$ は，ブラベー格子 $\rho(L)$ に付随する単位胞の体積を表す．

このエネルギー汎関数に関して，次の事柄を比較的初等的に証明することができる．

(1)　エネルギー E を最小にする実現 Ψ が相

---

*5)　crystal lattice（結晶格子）という呼び方をすることもある．

*6)　このような発想の背景には，数体のアーベル拡大を具体的に構成することを目指す「クロネッカーの青春の夢」との類似がある[16)]．

*7)　現実の結晶も振動子系と見なすことができるが，そのエネルギーは複雑な形をしている．

似変換を除いてただ一つ存在する．これを**標準的実現**という．

(2) 標準的実現 Ψ は，2 つの式

$$\sum_{e\in E_{0x}} \boldsymbol{u}(e)=\boldsymbol{0} \quad (x\in V_0),$$
$$\sum_{e\in E_0} \big(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{u}(e)\big)\boldsymbol{u}(e)=c\boldsymbol{x} \quad (\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d)$$

で完全に特徴付けられる（c は正定数）*8)．

標準的実現の具体的な構成法を与えておこう．$H_{\mathbb{R}}$ を H により張られる $H_1(X_0,\mathbb{R})$ の部分空間とし，$H_1(X_0,\mathbb{R})$ における $H_{\mathbb{R}}$ の直交補空間を $H_{\mathbb{R}}^{\perp}$ により表す：

$$H_1(X_0,\mathbb{R})=H_{\mathbb{R}}\oplus H_{\mathbb{R}}^{\perp}.$$

このとき $\dim H_{\mathbb{R}}^{\perp}=\operatorname{rank}L=d$ であるから，$H_{\mathbb{R}}^{\perp}$ の正規直交基底を選んで，$H_{\mathbb{R}}^{\perp}$ を $\mathbb{R}^d$ と同一視する．$P:C_1(X_0,\mathbb{R})\longrightarrow H_{\mathbb{R}}^{\perp}=\mathbb{R}^d$ を直交射影として，$\boldsymbol{u}(e)=P(e)$ と置くと，$\{\boldsymbol{u}(e)\}_{e\in E_0}$ が標準的実現の構成要素となっている．

前節で定義した $\{\boldsymbol{v}(e)\}_{e\in E_0}$ は，$H=\{0\}$ に対応する位相的結晶（X_0 の最大アーベル被覆グラフ）の標準的実現の構成要素になっていることが分かる．X_0 上の一般の位相的結晶の標準的実現は，最大アーベル被覆グラフの標準的実現を直交射影して得られる．こうして，代数幾何学の離散版と結晶理論が結びつくことになる．

最後に，標準的実現が「いかに標準的か」を理解してもらうため，3 次元と 2 次元の標準的実現の例を挙げておこう．

(i) ダイヤモンド*9), (ii) ロンスデーライト*10), (iii) 立方格子，(vi) 面心立方格子，(v) 体心立方格子，(vi) 3 次元カゴメ格子．

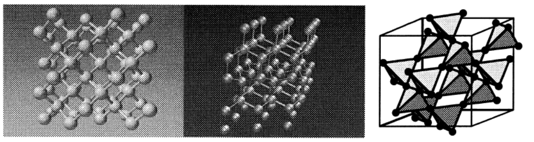


図 4 ダイヤモンド，ロンスデーライト，3 次元カゴメ格子．

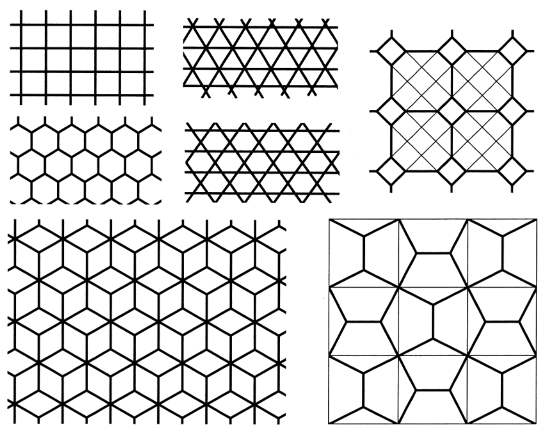


図 5 2 次元結晶の標準的実現．

なお，図 5 の右下の図は，カイロ・タイリングという図形であり，カイロの 5 角形タイル（Cairo Pentagonal tiling）ともよばれていて，エジプト・カイロの国際空港近くにあるという歩道の舗石にその名前の由来がある．

標準的実現は，上の例から予想されるように最大対称性を持つ実現であり，さらに位相的結晶上のランダム・ウォークの漸近挙動に密接に関連するのだが（東北大学の小谷元子氏との共同研究），これについては論文[6,9]および拙著[14]を参照されたい．

標準的実現は，仮想的結晶のデザインに使うことができる（名古屋大学の内藤久資氏による）．結晶学者により結晶デザインのアルゴリズムが提案されているが（文献 5），2004 年），out-put の例

*8) 1 番目の式は，ρ を固定したときの最小値を与える実現の特徴付けになっており，我々はこれを「調和的実現」（harmonic realization）とよんでいる（文献 8），2000 年）．結晶学のほうでは，2003 年に Delgado-Friedrichs と O'Keeffe[4]がこれと同じ実現を平衡配置（equilibrium placement）という名称で導入している．2 番目の式は，$\{\boldsymbol{u}(e)\}_{e\in E_0}$ が wavelet analysis における tight frame となっていることを意味している．

*9) ダイヤモンドの結晶構造は，2 頂点を 4 本の辺で結んで得られるグラフに対する最大アーベル被覆グラフの標準的実現である．

*10) 六方晶ダイヤモンド（Hexagonal diamond）ともよばれる．米国アリゾナ州のバリンジャー・クレーターを作ったキャニオン・ディアブロ隕石の中から，1967 年に初めて発見された．通常，ロンスデーライトはダイヤモンドの親戚と見なされるが，対称性の観点からは，完全グラフ K_4 に対する最大アーベル被覆グラフの標準的実現（K_4 結晶）が「ダイヤモンドの双子」と考えられる[10]．

を検証した限りでは，我々が定義した標準的実現（2000 年）と一致するようである．

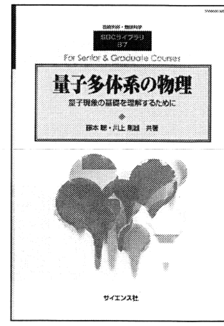
参考文献

1) R. Bacher, P. De La Harpe, and T. Nagnibeda, The lattice of integral flows and the lattice of integral cuts on a finite graph, *Bull. Soc. Math. France*, **125** (1997), 167–198.
2) M. Baker and S. Norine, Riemann-Roch and Abel-Jacobi theory on a finite graph, *Adv. in Math.*, **215** (2007), 766–788.
3) S.J. Chung, T. Hahn, and W.E. Klee, Nomenclature and generation of three-periodic nets: the vector method, *Acta. Cryst.*, **A40** (1984), 42–50.
4) O. Delgado-Friedrichs and M. O'Keeffe, Identification of and symmetry computation for crystal nets, *Acta Cryst.*, **A59** (2003), 351–360.
5) O. Delgado-Friedrichs, Barycentric drawings of periodic graphs, *LNCS* **2912** (2004), 178–189.
6) M. Kotani and T. Sunada, Albanese maps and off diagonal long time asymptotics for the heat kernel, *Comm. Math. Phys.*, **209** (2000), 633–670.
7) M. Kotani and T. Sunada, Jacobian tori associated with a finite graph and its abelian covering graphs, *Advances in Apply. Math.*, **24** (2000), 89–110.
8) M. Kotani and T. Sunada, Standard realizations of crystal lattices via harmonic maps, *Trans. A.M.S.* **353** (2000), 1–20.
9) M. Kotani and T. Sunada, Spectral geometry of crystal lattices, *Contemporary Math.*, **338** (2003), 271–305.
10) T. Sunada, Crystals that nature might miss creating, *Notices Amer. Math. Soc.*, **55** (2008), 208–215.
11) T. Sunada, Discrete geometric analysis, *Proceedings of Symposia in Pure Mathematics*, (ed. by P. Exner, J.P. Keating, P. Kuchment, T. Sunada, A. Teplyaev), **77** (2008), 51–86.
12) T. Sunada, Lecture on topological crystallography, *Japan. J. Math.*, **7** (2012), 1–39.
13) T. Sunada, Topological crystallography, Springer から出版予定．
14) 砂田利一，『ダイヤモンドはなぜ美しい？—離散調和解析入門—』，シュプリンガー・ジャパン，2006 年．
15) 砂田利一・他，「現代幾何学の生成」，『現代幾何学の流れ』，日本評論社，2007 年．
16) 砂田利一，ガロア理論体験記，「現代思想」**39(5)**，59–69, 2011 年 4 月号，青土社．
17) 砂田利一，『現代幾何学への道—ユークリッドの蒔いた種—』，岩波書店，2010 年．
18) 高木貞治，『近世数学史談』（岩波文庫），岩波書店，1995 年．

（すなだ・としかず，明治大学理工学部）

量子多体系の物理

量子現象の基礎を理解するために



藤本聡・川上則雄共著，B5 判，184 頁，本体 2190 円，サイエンス社

本書は物性物理学，特に量子多体系に関して用いられる場の理論的な様々な手法とその応用例を幅広くカバーした本である．いわば物性物理で使われる場の理論についての「広域地図」である．

例えば大阪から車で東京ディズニーランドに行きたいとしよう．大域的な地理の知識がないと，例えば大阪市内の地図ばかり見ていてもどちらに行ったらいいか分からない．まず広域地図で東京の方角を確認し，どの高速道路のどちら方面に向かえばよいかを見ておく必要がある．また広域地図があれば，途中にどんなスポットがあるか探索ができる．寄り道で思わぬ収穫が得られることもあるだろう．

通常，専門書は市内地図のようなものであって，その「市内」（分野）の詳細は分かるが，それらの道路がどの方面に向かうかはあまり教えてくれない．専門書を読むとき，式変形のフォローに精いっぱいで，読み終えても結局全体で何をいいたいのか，何に使えるのか分からなかったという経験をお持ちの方も多いであろう．また研究上での課題に直面した際，専門書を買ったもののどこを読んだらいいか分からないということもあるかもしれない．そんなときに役立つのが広域地図であって，「広域地図」たる本書は，物性物理の様々な理論計算手法がどのように位置づけられているかという大局観を分かりやすく教える名著である．

本書は最先端の数多くの手法や話題をコンパクトにまとめていて，それぞれの話題は単独で専門書 1 冊になるような豊富な内容を持っている．読むのに長い時間を要する専門書と違い，本書では詳細や導出を省略することで全体の流れをつかむことに重点をおいている．この本のみで計算の詳細までできるようになるのは無理であるが，それは本書の目指しているところではない．まずこの本で分野の概略や応用例をつかんでおいてから，必要に応じて，専門書で詳しい計算法などを勉強すればよい．

以下に本書の内容について紹介する．第 1 章「量子多体論の基礎」では，第 2 量子化の簡単な紹介に付随して，組ひも群，マヨラナフェルミオンまで紹介している．その後ボゾン系・フェルミオン系・スピン系の経路積分の定式化，グリーン関数と線型応答理論まで至っている．マヨラナフェルミオンの話は最近注目を集めており，このあたりに興味がある人にもお勧めできる．第 2 章「くりこみ群の方法」では，くりこみ群の一般論を展開せずに，いくつかの物性での応用例を紹介することでくりこみ群の理解をさせるという方法をとっている．例えば，フェルミ粒子系と超伝導不安定性，ボゾン系（スピン揺らぎ，超伝導揺らぎなど）と電子系が結合した系，非線型シグマ模型，Berezinskii–Kosterlitz–Thouless 転移などについてくりこみ群方程式とそれから導かれる物理的性質がテンポよく述べられている．

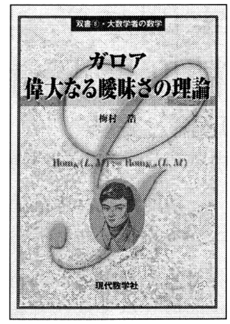
次に第 3 章「共形場の理論と 1 次元量子系」では，量子揺らぎが顕著な 1 次元量子系の臨界現象の記述に用いる共形場理論について，基礎から解説している．共形変換，Virasoro 代数から始まり，有限サイズスケーリング，ボゾン化法と Tomonaga–Luttinger 液体などまで説明がなされている．ハバード模型の共形場理論による記述，近藤効果など物性物理での応用例について述べているところが大きな特徴である．

第 4 章「動的平均場理論」では，強相関系を扱うための強力な手法の一つである動的平均場理論について解説されている．その定式化を用いてモット転移を議論し，さらに動的平均場理論に空間的揺らぎを取り入れる有効クラスタへの拡張，フラストレート電子系でのモット転移などにも触れている．

このように内容を凝縮して本書を執筆した著者の苦労がうかがえる．これだけ豊富な内容を約 170 ページ，厚さ約 1 cm で収めている著者の力量に脱帽する．大学院生でこれから新しくこの分野の研究を始める人のための入門書として，また，場の理論の予備知識を持っていて，その物性への応用を知りたい研究者のための本として有用であろう．

村上　修一（東京工業大学大学院理工学研究科）

ガロア
偉大なる曖昧さの理論



梅村浩著，四六判，262 頁，本体 2300 円，現代数学社

激動の時代のフランスに生まれ，激動の人生を駆け抜けて，20 歳で決闘に斃れた天才数学者ガロアとその業績について書かれた本はいろいろあるが，本書は面白さとわかりやすさで，最もすばらしい本の一つと思う．

一般向けの本は，数式を除かねばならず，いくら巧みに言葉で説明されても，（大部分の）読者は一体何を語っているのか，本当のところはピンとこないかも知れない．一方，数式をたくさん使ったら，今度は難しすぎて，別の意味で，やはりピンとこないであろう．この辺が，一般向けの本の難しいところである．本書はその辺りのバランス感覚が絶妙である．

本書の第 2 章のガロア理論には，時々数式が入る．それら数式は，高校もしくは大学 1–2 年程度で，そんなに難しくない．ただし，この章や第 3 章に出てくる数学用語については，最後の第 4 章の「数学の基礎」で，（数学好きの）高校生にもわかるように解説されている．第 2 章のガロア理論の説明は大変わかりやすい．あの難解なガロア理論がこんなに簡潔にわかりやすく説明されるのかと，驚くばかりである．それはずばり本質をついているからであろう．この章の後半で，ガロア理論の理解を深めるために，正多角形の（目盛りのない定規とコンパスによる）作図問題を論じている．

本書の第 1 章はガロアの伝記で，とても面白く，一気に読ませる．フランス革命やナポレオンの話，ガロアと同時代のショパンの話，エコール・ポリテクニークやエコール・ノルマル・シュペリュールについての話も面白い．この章の最後近くのガロアの遺書の所で，重要な指摘がある．ガロアの言う「曖昧さの理論」とは，彼の未発表の理論でなく，彼のガロア理論そのものであると断定している．遺書をよく読めばそのように解釈せざるを得ないと言う．さらに欧米でもその解釈が一般的なようであると言う．私（評者）は高木貞治の『近世数学史談』を読んで以来，「曖昧さの理論」を彼の未発表の理論のことであると思ってきた．長年の蒙が啓かれた気がする．ガロアが自分の理論を「曖昧の理論」と呼ぶだろうかと，私のような読者が思うのは，日本語をキチンとしないせいで，「曖昧の理論」でなく，「曖昧さの理論」である．この場合，「曖昧さ」とは，「ゆとり」とか（車のハンドルなどの）「遊び」のことである．「観測方法を指定して代数方程式を観測するとき，観測の曖昧さ，観測不能な部分として，ガロア群が取り出せる．」このように著者は説明している．

本書の第 3 章も非常に興味深い．ガロアが目指したであろう「曖昧さの理論の解析学への応用」，すなわち，「ガロア理論の微分方程式への応用」の話である．故久賀道郎先生が『ガロアの夢』（日本評論社，1968）で，「線形微分方程式のガロア理論」を書いたが，本章はその後の発展と，「非線形微分方程式のガロア理論」の最近までの進展の解説である．その話は，数式も少し入るが，いろいろな数学者の写真入り，エピソード入りで，興味深い．著者梅村氏は，この方面で決定的な仕事をした世界的権威の一人である．彼自身が直接経験したエピソードも書かれている．ある過激なフランス人数学者と梅村氏との緊迫した会見の様子は，ドラマのようである．

本書の第 4 章は，集合，写像，群，環，体など，他の章に現れた数学用語の解説をして，数学的部分を補強している章である．簡潔ではあるが説明が上手で，実例も折り込み，明快である．

本書には，著者の広く深い学識が随所に現れるが，同時に個性も所々に現れてその意味でも興味深い．例えば，第 2 章の中の小節の題名の一つに，「静かな刺客は恐ろしい」，第 3 章の中の小節の題名の一つに「妄想と正気のはざま」，数学的基礎を論じている第 4 章でさえ，その中の小節の題名に，「犯人潜伏中」，「彼は既に死んでいる」と言った奇妙な題名が現れ，読者の興味を誘っている．

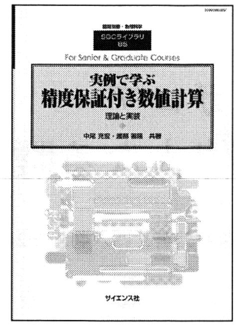
素晴らしい本が現れた．多くの方々に勧めたい．

難波　誠（追手門学院大学経済学部）

実例で学ぶ
精度保証付き数値計算

理論と実装

中尾充宏・渡部善隆共著，B5 判，216 頁，本体 2362 円，サイエンス社



「精度保証付き数値計算」という言葉を聞いて，「得られた数値結果が何桁まで合っているかを保証している計算かな」という連想は，著者によって構築された精度保証付き数値計算の価値をほとんど述べていない．それらは理論的な価値と実用的な価値がある．

理論的価値は，非線形偏微分方程式の解の存在証明が数値計算を経由してできることである．解析的な手法で証明できなくても，この方法ではできる．偏微分方程式でできるということは常微分方程式でもできる．もちろん，すべての非線形偏微分方程式でできるわけではないし，後で述べる数値的検証が成功したときに解の存在が証明できるのである．そのとき，解の具体的形状を高精度に捉えることもできている．半線形楕円型境界値問題等が主要な成功例である．

実用的価値は，偏微分方程式で記述される問題の数値計算結果の完全な事後評価を与えることである．常微分方程式に対しても同様である．事後評価というのは，数値計算解と厳密解との差を具体的数値で評価することである．やはり数値的検証が成功したときに結果が得られ，対象となる方程式は上述の場合と類似である．

計算機で実数を取り扱う際に常に生じる問題は丸め誤差である．計算機では有限桁しか使えないので誤差なく表現できる実数は限られている．それを克服するために，一つの実数に対して，計算機で誤差なく表現できる数を両端とする区間を対応させる．加減乗除の結果も区間で表現する方法を区間演算と呼び，厳密な実数値はその区間内にある．有限回の加減乗除で済む問題，例えば，正則な係数行列を持つ連立 1 次方程式を解く問題なら，原理的には区間演算を実行すれば解の存在範囲が厳密に分かる．求まった区間が狭ければ実用に耐え，その桁内で合っている．

連立一次方程式で求めるべきはベクトル，言い換えれば，有限次元ベクトル空間の 1 点である．一方，偏微分方程式で求めるべきは関数であり，無限次元関数空間の 1 点である．そのために，著者は偏微分方程式をあるヒルベルト空間の不動点形式に変換して，シャウダーの不動点定理を用いて解の存在を示そうとする．定理を適用するには，候補者集合と呼ばれるある無限次元集合を作り，その値域がそれ自身に含まれることを示せば良い．しかし，ここで本質的な疑問が生じる．有限計算しかできない計算機で，無限次元集合の取扱いができるはずがない．著者は，有限次元集合とそれに直交する無限次元ではあるがノルムが小さい関数からなる候補者集合を構成し，値域に対してもこの直交分解を用いて，それぞれが，対応する集合に含まれることを示す．有限次元部分は区間演算で解決できる．無限次元部分は元来，計算機では処理できないが，誤差解析の理論的結果を持ち込み対象領域を細かく分割して計算すれば解決する．この有限次元と無限次元に分けるアイデアは著者の一人によって四半世紀前に出され，無限次元問題の精度保証付き数値計算の基盤になっている．その後の種々の発展も本書で述べられている．

実際に精度保証付き数値計算を行って数値的検証に成功する，つまり，上記の包含関係を示すには，良い近似数値解を作成しそれに対して区間演算を行う．現状で多くの人に実現可能な実装方法として，著者は MATLAB +INTLAB の使用を薦めている．MATLAB は科学技術計算に向いた市販のソフトウェアであり，INTLAB はハンブルグ大学ルンプ教授によって開発された区間演算を行うための MATLAB ツールボックスで開発者のサイトから無料でダウンロードできる．有限要素法やスペクトル法を使って MATLAB で良い近似数値解を得る．後の処理を考えると，差分法よりガレルキン近似に基づくこれらの方法が良い．その解に対して，INTLAB を使って区間演算による数値的検証のプログラムを作成する．その過程は丁寧に解説されており，精度保証付き数値計算に多くの経験をもつ著者ならではのコメントも有用である．具体例では，有限要素法による近似解の計算から区間演算による検証計算まで，非線形偏微分方程式の精度保証付き数値計算コードの全体が見通し良く記述されている．また，熱対流問題やナヴィエ・ストークス問題の結果も紹介されている．精度保証付き数値計算を始めてみようという人には必読の書である．

田端　正久（早稲田大学理工学術院）

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

福島 邦彦

1982年7月号



筆者が生物の脳の視覚神経系のメカニズムに魅せられて神経回路の研究を始めたのは，1965 年頃であった．1982 年の特集号に筆者が執筆した「ネオコグニトロン」もそのような研究の成果の一つである．ネオコグニトロンは，脳の視覚神経系をヒントに作られた人工神経回路で，階層的な多層構造を持ち，パターン認識能力を学習によって獲得していく．

ネオコグニトロンの研究は現在も発展を続けている．新しい学習方式やトップダウン結合の導入によって，種々の新しい機能を備えた人工神経回路が作られている．二つ以上のパターンが同時に提示されても，それぞれのパターン一つ一つに注意を向けながら，順番に認識していく能力を持った回路，すなわち選択的注意機構を導入した回路も作成した．パターンの一部がほかの物体で覆い隠されていても，我々人間は隠されているパターンが何であるかを簡単に認識できることが多い．このような機能をネオコグニトロンに持たせることもできるようになった．

ネオコグニトロンを構成する個々の細胞（神経細胞）は，入力層（網膜に対応）に与えられた視覚パターンが持つ特定の特徴に選択的に反応する．このような細胞は，自分の担当する特徴が入力パターンに含まれている場合にのみ反応出力を出す．ネオコグニトロンに種々の学習パターンを繰り返し見せていると，このような特徴抽出細胞が回路内に自動的にでき上がっていく．

ネオコグニトロンの学習には，いわゆる winner-take-all 型の競合学習がよく用いられてきたが，筆者は最近，winner-kill-loser 法，add-if-silent 法，内挿ベクトル法などと名付けた新しい学習法や認識法を提唱して，ネオコグニトロンをさらに効率的に学習させることができるようになった．従来よりも小さな規模の回路で，従来よりも高い認識率を得ることができるようになったのである．

1982 年の特集号が発行されて間もなく人工神経回路研究の第 2 回目のブームが起こり，猫も杓子も「ニューロ」と言うような時代になっていった．しかし現在はそのブームも去り，研究が再び停滞気味になってきているように感じる．脳を実験的に調べる神経生理学の研究では，新しい実験手法の発展によって，数多くの実験結果が得られるようになってきたが，脳における視覚情報処理のメカニズムの完全な解明には，まだほど遠いのが現状である．そこでいま求められているのは，理論的側面からの脳の研究である．生理学実験で得られた事実をもとにして，不明な箇所は大胆な仮説で補いながら，脳と同じような働きをする神経回路モデルを構築することによって，脳の解明を目指す理論的研究の必要性は，30 年前よりもさらに高まっている．

（ふくしま・くにひこ，ファジィシステム研究所）

想像力の翼を広げて

瀬山 士郎

数学的な感覚というのは不思議な言葉である．人の感覚にはいろいろなものがあって，その中の一つに数学的な感覚があるのだろうか．私には，人の感覚とは全体として人の感覚であって，特に“数学的な”という形容詞を付けて呼ばなければならない感覚があるわけではないという考えがある．人は総合的に感じるのであり，それは一つ一つ細分化して考えられるものではないのではないか．数学的な感覚があるなら，物理的な感覚とか化学的な感覚，あるいは国語的な感覚というのがあるのだろうか．たぶん，極端に細分化すれば，その学問分野に固有の知識に裏打ちされた感覚もあるのだろう．そして，仮に数学だけが特別に数学的な感覚という呼び方を引き出してしまうような，何かがあるとすれば，それを考えてみるために，このようなタイトルのリレー連載が企画されたのだと思う．その何かについて改めて考えてみることは，数学という学問の性格を多少ははっきりとさせてくれるきっかけになるかも知れない．そんな立場で数学的な感覚について考察してみたいと思う．

1. 不思議感覚

仮に不思議感覚と呼びたい感性がある．それは，「不思議だな，どうしてだろう，なぜだろう，その理由を知りたい」という感覚である．わけを知りたい気持，つまり普通は知的好奇心といわれるものである．これも数学に限ったことではない．理科系の学問ならそのすべての基盤として，この不思議感覚，なぜだろう感覚があるに違いない．この宇宙はどうしてできたのだろうとか，命があるとはどういうことだろうとか，空が青いのはなぜだろうとか，そこには子どもたちが一度は通過していくと思われる様々な疑問がある．ニュートンによる万有引力の発見も，実はなぜだろう感覚の賜物だったともいえる．もちろん自然科学だけではない．人文科学でも社会科学でも，その基本には「わけを知りたい」という欲求がある．社会に貧富の差ができてしまうのはなぜだろう，あるいは人が生きていることの意味を知りたいなどという欲求は，素朴であるがゆえにとてつもない難問となる疑問である．

しかし，このような根元的な疑問には明確な解答がないものもたくさんある．明確な解答がないからこそ，宗教や哲学はこれらの疑問について，人の歴史が始まって以来常に考え続けてきたのだともいえよう．ところが，このような疑問のうち，誰でもが明確に納得できることだけを頼りにして，それさえ共通の了解としてしまえば，あとは合理的に理詰めに考えると解答を見つけることができるような疑問がある．その代表例が数学における

疑問であった．

数学だってなぜだろう感覚を基礎として出発することは，他の多くの学問と同じことだ．数学はなぜだろう感覚に明確な解答を付けようとして出発した．古代から数学者たちはこの世界に散在する多くの疑問に答えようとした．そして，ある約束の下では，その疑問に明解に答えられることを見出した．その結果生まれたのが数学の金字塔，ユークリッドの『原論』である．よく知られるように，原論はいくつかの公準（現在でいう公理）から出発し，明解な演繹論理によって数学的な事実を導こうとする態度に貫かれている．2等辺三角形の両底角が等しいことは経験的には明らかである．それは2等辺三角形を中線で折ってみれば分かることだ．しかし，なぜそうなるのだろうか？という問いかけに「折ってみれば分かる」という解答は満足を与えない．それは，三角形を中線で折るという行為が，事実の確認にはなっているかも知れないがその事実が成り立つ理由を知りたい，という不思議感覚には答えていないからだ．不思議感覚に答えるためには，別の解答が必要なのである．それに答えようとしたのが『原論』の体系だった．こうして数学は形而下の経験から出発して，いわゆる経験を超えて形而上の経験へと進化し深化していったのである．数学での不思議感覚は，なにも活動中の専門の数学者だけに限って大切なのではない．むしろ，未来の数学者のために，いま現在，数学を学んでいる子どもたち，そして大学生にとってこそ大切な，数学のもっとも基礎を支えている感性だと思います．

いくつか例を挙げよう．まずは小学生版から．1から9までの数を足したり引いたりして，いろいろな数を作る．例えばすべてを足せば1から9までの和で45を作ることができる．では1が作れるか．作れる．子どもたちは試行錯誤で1になる計算式を見つける．しかしどうやっても偶数を作ることはできない．それは何遍も試してみれば経験的には発見できる事実である．しかし，どうして偶数は作れないのか．これが子どもたちにとってのなぜだろう感覚である．ここには単に計算ができるということではなく，足し算という単純な計算の中にある，数のパリティという構造の発見が潜んでいる．中学生，高校生ともなれば，例えばコンパス，定規による角の3等分の不可能性，あるいは5次方程式の代数的解の不可能性などの話題に関心を持つかも知れない．いくらやっても作図できない，あるいは，どうしても解けない，だからできないのだ，ではなく，なぜできないのか，なぜ解けないのかの構造的理解は，数学という学問の性格をくっきりと浮かび上がらせるに違いない．それは理性と論理による「なぜ」の追求である．こういった問題と対面することが数学的感覚を養うのに役立つ数学的経験に他ならない．プロの数学者でも，例えばバナッハ・タルスキのパラドックスなどを不思議と感じる感覚，これはさらに遡れば実数とは何かという問題に通底するはずだが，この感覚が数学を研究する上での大切な感性だと思う．あるいは，コンピュータを駆使した1976年の4色問題の解決について，あの解答ではどうして平面グラフが4色で彩色可能なのかという疑問に答えていない，という意見があることも紹介しておこう．

2. 形式の受け止め方

数学は記号と形式を操る学問である．小学校の数計算に始まって，数学はいつでも記号を取り扱ってきた．記号には大きく2つの側面がある．一つは記号を形式的に運用，変形することで記号が人に代わって考えてくれる，という役割である．子どもたちがこれに出会う典型的な例は，中学校での連立方程式である．鶴亀算を算数で解こうとすれば，「全部を鶴と考えると」とか「亀が前足を引っ込めて」などの考え方が必要となる．しかし，いったん連立方程式を学んでしまうと，「全部を鶴と考えると」というアイデアは，一つの未知数を消去するという形式の中で自然に実現されていく．記号が人に代わって考えてくれるとはこういうことだ．ここに記号と形式の持つ威力がある．それは進んだ数学でも同じで，群論を学び，群を具体的に計算し，その計算結果をもう一度解釈することによっ

て，私たちは思考を節約できる．数学的感性の一つの側面がここにある．それは，記号化を面白いと感じる心である．数学を嫌う人は数学記号を毛嫌いする傾向があるらしいが，それは数学に対するもっとも大きな偏見の一つであろう．ちょっと断っておくと，算数的思考で式変形を形式でなく意味で取り扱おうとするのはそれなりに面白く興味のある問題でもある．記号には意味がある．その意味を理解することと，その記号を形式的に運用することは数学理解の両輪である．記号の意味理解とはどういうことかをもう少し説明しよう．

記号のもう一つの大切な側面は，記号が概念そのものを表現するということだ．それは記号の持つ意味である．別の言葉でいえば，記号がイメージ化されることといってもよい．ほとんどの数学者は n 次元空間 $\mathbf{R}^n$ という記号からあるイメージを喚起されるに違いない．そのイメージは数学者それぞれによって違っているかも知れないし，また，違っていて当然でもある．しかし記号 $\mathbf{R}^n$ が n 次元空間という概念（イメージ）を数学者の心の中に呼び覚ますということは共通している．その共通部分が記号 $\mathbf{R}^n$ の意味に他ならない．くどくどとした説明文ではなく概念を記号でイメージとして表してしまうこと，そしてそのような経験を積み重ねることは，数学的感性を磨くための道具として記号が持っているもう一つの大切な側面である．これが記号の意味の理解ということだ．概念が記号によって簡潔に表現できるということを実感するためには，例えば中学生が学ぶ分配法則を言葉で表現してみればよい．それがいかにややこしく困難なことなのかが分かる．それに引き替え，同じことを記号で表した $a(b+c)=ab+ac$ がいかに綺麗に簡潔に分かり易く分配法則という概念を表現しているかが実感できると思う．考えてみれば，日本語も一種の記号である．私たちは日本語で書かれた文章を読み解くことに普通は何の不自由も感じない．数学記号は一種の世界共通言語である．高度な専門用語は専門の数学者に任せるとしても，そのリテラシーを身につけることは，多くの人にとってもう一つの世界を開く道具になるに違いない．形式は記号によって自由を獲得し運用され，記号は形式的な扱いを通して意味を獲得する．この，形式，記号，意味の3つの世界を数学を学び研究する者が相互に自由に行き来できるために全体を統括しているもの，がイメージに他ならない．数学的な感覚はこれを一つの基盤としている．

もう一つ，記号化とは抽象化ということである．数学でも出発点は具体的な研究対象であるが，数学は概念という抽象的研究対象を記号化という方法で研究する．そのことを理解することは数学的な感性を磨く上で欠くことができないだろう．実際，その萌芽はすでに小学校の分数理解あたりから始まっているともいえる．抽象的概念と具体的事物の間を自由に行き来できるような心のあり方も数学的考え方の源流の一つである．

3. 論理的ということ

数学は論理の学問だといわれる．それは数学における証明という方法に端的に表現されている．数学では，証明できることはすべて証明されなければならない，とはよくいわれることで，どのような大数学者が述べたことであっても，証明を欠いている数学的言明は数学としての事実ではなく，仮説，予想である．最初にも書いたことだが，数学的事実を検証するのは実験ではない．これが数学を他の自然科学から峻別してきた特徴である．そして，証明はどこにも曖昧な個所があってはならない．一部の隙もない論理の積み重ねによって，すべての命題が明解に辿れなければならない．数学のこの性格こそが，数学という学問をある種の「信仰心」の対象に祭り上げたし，一部の熱狂的な数学ファンを生み，一方で極端な数学嫌いを生み出した．では，証明という概念が古代から数学に必要不可欠な絶対的条件だったかといえば，必ずしもそうはいえない．証明はギリシア数学の大きな柱として生まれ，ヨーロッパ数学を通して近代には数学一般の規範となった．しかし，東洋の数学は証明という概念を生み出さなかったようだ．なぜヨーロッパ数学だけが証明を生み出したのか

については『ギリシア人の数学』(伊東俊太郎，講談社学術文庫）に詳細な分析がある．

ところで，数学の証明というと演繹論理，三段論法ということになる．演繹論理は確かに数学に普通の意味での絶対性を付加した重要な論理である．演繹論理はいわば後追いの論理であって，それは完成された数学を追いかけるときには必要にして十分な力を発揮する．演繹論理をきちんと辿ることができる力は数学を理解する上でどうしても必要だし，数学を学ぶことの大きな部分を占めている．しかしながら，数学を創り出そうとするとき，多くの数学者がそれと意識せずに使っている論理は演繹論理ではないのではなかろうか．それはアブダクション（仮説論理）と呼ばれる論理ではないかと思われる．仮説論理とは形式的にいえば「A である．B である．したがって A ならば B である」という論理である．演繹論理はこのような形式でいえば「A である．A ならば B である．したがって B である」という論理で，この推論形式が普通にいわれる三段論法で，もちろんこの論理は正しい．仮説論理の推論形式もいわゆる真理表にしたがって計算すれば，正しい論理であることが分かる．A と B が正しければ，A ならば B は形式的に正しい．ところが，ちょっと立ち止まって考えてみれば分かることだが，「B である」が正しいのなら，B であることを証明しなければならない理由がないではないか！ しかし，普通の数学者がこの論理を使うときは，実は「B である」の部分は「B であることは直感的に正しい」であって，「私は B が正しいことを確信する」ということなのである．つまり，B であることが「数学的に」証明できているわけではない．多くの数学者にとって，数学の証明以前に B であることは直感的に正しいのである．数学者はこの直感に導かれて，仮説論理により A ならば B であることの証明を探す．すなわち，ミッシングリンクを求めて，A から B に至る論理の鎖を繋ごうとする．そしてこの鎖が完成した途端，仮説論理は「A である．A ならば B である．したがって B である」という演繹論理として完成し，B は晴れて直感的に正しい事実から数学的に正しい定理へと昇格する．おそらく多くの数学者の研究活動はこのようなメカニズムで行われているに違いない．ここで大切なことは B が直感的に正しいことを洞察する力であり，これが数学の感性に他ならない．私たちは論文や数学書などを通して数学を学ぶ．そのとき全面に出てくるのは演繹論理による定理の証明であり，それは仮説論理が完成した姿である．形式的な証明を理解し学ぶことが数学を学ぶ上で重要であることは間違いない．そのような学びを通して私たちは数学的な経験を積む．その経験に裏打ちされて，私たちは B であることを発見するための直感的な理解の仕方を学ぶ．数学の論理はややもすると形式的な演繹論理だけに限定されがちだ．しかし，生きて働く論理こそが数学的な感性の一番基本にあり，それはここで紹介した仮説論理であると思う．結論 B を洞察し，これが「正しい」ことを直感的に見抜く能力，これが仮説論理の力であり，この力を育てるのに王道はない．多くの数学的な経験を積み，いくつもの鑑賞に値する証明を辿り，実力を付けていく他はない．

4. 遊び心とパズル解きの面白さ

数学的な感覚を考える上で，もう一つ欠かせないのは，遊び心である．一頃，数学が何の役に立つのか，という一見もっともな，しかしよく考えてみるとほとんど意味のない問いかけが流行ったことがあった．「私が 60 歳になるまで使わなかったのだから，教える必要がない」などという意見は論外だが，(実際，一時期，こんな噴飯ものの議論が数学教育に対して通用してしまったことは本当に不幸なことだった．閑話休題）多くの「真面目な」数学教員たちがこの「何の役に立つのか」という問いかけを本物の問いかけと勘違いして，真面目に答えようとしてしまった．もちろん，この問いに数学として答えようとすることは大切だが，初等数学教育の場合，この問いかけは多くの場合，子どもたちの「自分が今学んでいる数学が面白くない」という感情の表れであって，人は今現在自分がやっていることが面白ければ，それが何の役に

立つのかなどという問いかけは行わないものなのである．やっていることを面白いと思う感覚，それが遊び心に他ならない．

数学における遊び心がもっとも端的に現れるもの，それがパズルである．少し大風呂敷を広げてしまえば，数学そのものが壮大なパズル解きという性格を持っている．不思議感覚とパズル解きの遊び心が手を繋ぎあったとき，例えばフェルマーの最終定理のような歴史に残る大問題が出現したし，不完全性定理という大定理が証明された．それほど大上段に振りかぶらなくても，子どもたちが無心に無邪気にパズルに取り組むときの感覚，それが数学の感性のもう一つの源流ではなかろうか．こんな言葉を思い出す．

「時として子どもたちの遊びは人生でもっとも重要なものだ」(『僧正殺人事件』ヴァン・ダイン)

多くの数学者はこんな子供心をいつまでも忘れずに数学の問題に取り組んでいる．もちろん，本格的な数学パズルとしての数学の未解決問題を解くことはとても難しい．しかし，そこまで行かなくても，子どもたちがパズルに取り組んで，それを解決したときに得られる満足感は，専門の数学者が未解決問題に挑戦しそれを解いたときに得られる至福の満足感と相似形なのだと思う．大きさは違っていても形は同じなのである．

数学的感性としての遊び心を養うためには，今いったようなパズルを楽しむことが大切だが，実はその気になって眺めれば，パズルだけではなく，数学の遊び心はいろいろなところに見つけることができる．普通には文学と数学はあまり相性が良くないと思われているようだが，そんなことはない．いくつかの文学作品の中には，数学の遊び心を満足させる記述がたくさんあるし，逆に，ある種の数学書は文学を読むように楽しむことができる．実をいうと，私は数学書が文学書として読まれることを一種の理想と考えている．数学の想像力と文学の創造力が結びついたとき，時として歴史に残る傑作が生まれる．ルイス・キャロルの『不思議の国のアリス』『鏡の国のアリス』がそれだ．ルイス・キャロルが本名をチャールス・ラトウィッジ・ドジスンというビクトリア朝を生きた数学者であることはよく知られている．この２冊は児童文学として書かれたものだが，読みようによってはもう一つの「非ユークリッド幾何学の世界」を描いているともいえる．

5. 自由な想像力こそすべて

数学的な感性の源流についていくつかのテーマを考察してみた．振り返ってみれば，結局数学的な感性についてもっとも大切なものは，自由な想像力，これに尽きる．不思議感覚も，形式と抽象への親和性も，論理的であるということも，遊び心も，すべては制限のない自由な想像力の羽ばたきという言葉に収斂する．かつて集合論の創始者カントルは「数学の本質はその自由性にある」と叫んだと伝えられる．カントルの言葉は集合論を受け入れようとしなかった数学者に対して向けられたものだが，この言葉はもっと広く，数学という学問の感性をもっとも基盤から支えるものに間違いない．自由に，なにものにも囚われることなく思考の翼だけを頼りに羽ばたくこと，これが数学の感性なのです．

（せやま・しろう，群馬大学名誉教授）

Neyman–Scott 問題とセミパラメトリック統計

推定関数の微分幾何

甘 利 俊 一

これまで，統計学の幾何学的基礎を論じてきた．しかし専門的すぎて面白くないと感じた読者もいるだろう．そこで今回一見易しそうで，実は難しい問題を扱ってみよう．すぐにも解けそうなこの問題が，実は永年統計学者を悩ませた難問なのである．

統計モデルは一般に多数のパラメータを含む．しかし，推定したいパラメータはそのうちの一つで，他のパラメータの値には興味がないとしよう．興味のないパラメータ（局外母数）が観測ごとに異なる値をとり，観測数 N が増えるにつれ，局外母数の数も無限に増えていくとする．この問題を Neyman と Scott が提起して，統計学者を長い間悩ませた．最尤推定が必ずしも良くないからである．ではどうすればよいか，ここに情報幾何が登場し，問題の仕組みを解きほぐす．

15.1 Neyman–Scott 問題

Neyman と Scott が 1948 年に発表した論文に学界は驚いた[1)]．簡単でありながら最良解が見つからない問題として以後何十年にもわたって理論家を悩ませた．最尤推定は必ずしも良くないという結果を導き，最尤推定信仰に疑問を投げかけた．具体的な例から始めよう．

比例関係の推定：未知の鉱山に入ったところ，鉱石がごろごろ転がっていた．それを N 個拾ってきた．資料から比重を推定して，この鉱石が何であるかを知りたい．そこで真の比重を u とする．まず，i 番目の鉱石の体積と重さを測定する．それらを x_i, y_i とおこう．もちろん測定誤差があるから，未知の体積の真の値を ξ_i とすると真の重量は $u\xi_i$ になるはずである．測定値は誤差を含むので，それぞれ

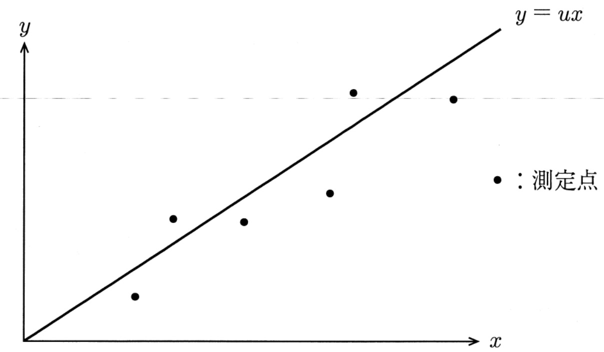


図 15.1　N 個のデータ (x_i, y_i) と回帰直線 $y = ux$.

$$x_i = \xi_i + \varepsilon_i, \quad y_i = u\xi_i + \varepsilon'_i \tag{15.1}$$

のように書ける．ここで測定誤差 $\varepsilon_i, \varepsilon'_i$ は独立で平均 0 のガウス分布に従うものとし，その分散は共に σ^2 であるようにスケールを揃えておく．このとき，i 番目のデータの確率分布は

$$p(x_i, y_i, u, \xi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x_i - \xi_i)^2 + (y_i - u\xi_i)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{15.2}$$

である．ここで u が推定したいパラメータであり，ξ_i は毎回違った値をとるが，その値はどうでも良いパラメータである．これを局外パラメータまたは撹乱パラメータという．測定回数 N を増やせば，局外母数は $\xi_1, \cdots, \xi_N$ でその数は N に比例して増えてしまう．全データ $D = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)\}$ の確率分布は積で書けて次式になる．

$$p(D, u, \xi_1, \cdots, \xi_N) = \prod p(x_i, y_i, u, \xi_i). \tag{15.3}$$

観測した点 (x_i, y_i) を 2 次元平面にプロットしたのが図 15.1 である．問題はこのデータに合う，原点を通る直線 $y = ux$ を求めるだけである．いかにも易しそうである．この問題に対するもっともらしい解法をいくつか考えてみよう．

1) 最小二乗解

原点を通る勾配 u の直線を引くと，データはこの線から上下に少し外れる．そこで，線からの上下方向のずれの二乗和を最小にするのが，最小二乗法である．式で書けば

$$L = \frac{1}{2}\sum (y_i - ux_i)^2 \tag{15.4}$$

を最小にすれば良いから，答はすぐに求まり，

$$\hat{u} = \frac{\sum y_i x_i}{\sum x_i^2}. \tag{15.5}$$

残念なことに，最初に思いつくこの方法では，得られた答は N をいくら大きくしても $\hat{u}$ は真の値に近づかない．すなわち一致推定量ですらない．これは，

上下方向の測定誤差 ε_i' 以外に，左右方向にも誤差 ε_i（x_i に対する測定誤差）があることを考慮に入れていないからである．

2) 総平均法

では，鉱石一個ごとに u を推定して，i 番目の鉱石での推定を $\hat{u}_i = y_i/x_i$ と置き，これらを平均した推定量

$$\hat{u} = \frac{1}{N}\sum \hat{u}_i \tag{15.6}$$

はどうだろう．これは一致推定量となるから最小二乗法よりは良い．でも，あまり良いとは思わないだろう．なぜであるか各自考えてみよ．

3) 総平均法

いっそのこと，鉱石全体の体積と重みを求め，それを割り算した

$$\hat{u} = \frac{\sum y_i}{\sum x_i} \tag{15.7}$$

はどうだろう．これはもっともらしいが，なんとなくウソくさい．本当にそうだろうか．

4) 最尤推定または全最小二乗法

最尤推定は，データ D から未知パラメータ $u, \boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \cdots, \xi_N)$ のすべてを，尤度が最大になるように一挙に推定する．すなわち，最大化問題

$$\max_{u, \boldsymbol{\xi}} p\,(D, u, \boldsymbol{\xi}) \tag{15.8}$$

を解いて $\left(\hat{u}, \hat{\boldsymbol{\xi}}\right)$ を求め，$\hat{u}$ を答とする．(15.3) 式の対数を u と $\boldsymbol{\xi}$ で偏微分し，それらを 0 とおく．そこから $\boldsymbol{\xi}$ を消去すれば，答えは方程式

$$\sum (y_i - ux_i)(uy_i + x_i) = 0 \tag{15.9}$$

の解として与えられる．実はこれは，各データ (x_i, y_i) から回帰直線（勾配 u の直線 $y = ux$）へ垂線を下ろし，その長さの二乗和を最小にする方法と同じになる．この方法は全（トータル）最小二乗法と呼ばれ，良く使われている．

最後の解が一番もっともらしくて良いように思えるかもしれない．でも必ずしもそうではないから面白い．では何が良いのか，これが何十年にもわたる難問であった．まず，この種の問題をいくつか見ておこう．

秤の問題：1)　いま，未知の資料が 1 個あるので，その重量 u を知りたい．これを秤で計ると誤差が入り，測定値 x は平均 u，分散 $\xi = \sigma^2$ のガウス分布に従う．ところで秤がたくさんあったとする．どの秤の精度が良いのか（σ^2 が小さい秤が良い）わからない．最初の秤で，m 回測定し，ついで次の秤を使い m 回測定する．これを繰り返す．このとき，u は共通だが，秤の精度 $\xi_i = \sigma_i^2$ は秤 i 毎に違い未知である．測定データの全体をどう総合して u を求めたらよいだろうか．

2)　今度は秤は 1 個しかなくて，資料がたくさんあったとする．i 番目の資料



図 15.2　ウェールズ地方の環状列石ストーンヘンジ．

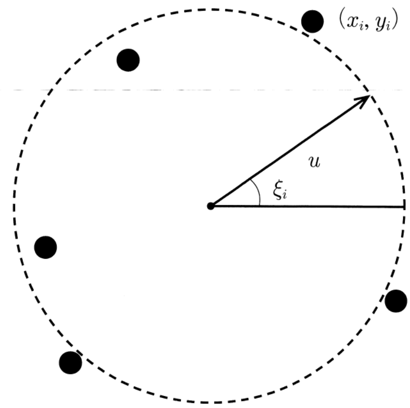


図 15.3　ストーンヘンジの円の半径 u.

の真の重さを ξ_i とし，これは未知である．知りたいのは秤の精度，つまり分散 $u = \sigma^2$ である．重さの違う各資料を m 回ずつ計ったとして，そのデータを総合して秤の精度 u を推定するのに，どうしたら良いか．

ストーンヘンジの問題：　ストーンヘンジ（環状列石）はイギリスのウェールズにある古代の巨石文化の遺跡である（図 15.2）．ここでは列石が円周状に並んでいたと想定される．現在は位置も少しずれ，そのいくつかは失われ，また中心の位置もわからない．列石のなす円の半径を u とし，これを知りたい．i 番目の列石は，極座標で表して (u, ξ_i) の位置にあるべき（ξ_i は偏角）とする．これが現代では平面座標で (x_i, y_i) の位置に観測される．x_i, y_i の両方に誤差があり，誤差は独立なガウス分布に従うとしよう．半径 u を知りたいとき，ξ_i は局外母数である．古代のロマンの香りのただようこの問題は，易しそうに見えるが難しい．面白いことに，現代の画像処理技術でこれを発展させた問題が登場し，コンピュータビジョンの専門家が必死で取り組んでいる[6)]．

この他，神経科学でもこうした問題が現れる．2 つのニューロンの発火の相関が知りたい（これが u で一定とする）が，各ニューロンの発火率は測定毎に変化しているという問題である．発火率は未知で測定毎に違う（局外母数）という条件で，相関を推定する問題である．また，発火率が変動する条件下での，ニューロン発火の不応期の特性をガンマ分布を用いて推定する問題もある．独立成分分析もこの種の問題として定式化できる．

この問題は u だけでなく，$\xi_1, \cdots, \xi_N$ も未知である．そこで ξ_i はある未知の確率分布から毎回独立に発生したものと想定し，その確率分布の密度関数を $k(\xi)$ と書こう．$\xi_1, \cdots, \xi_N$ の代わりにその発生機構 $k(\xi)$ を未知関数として取り扱う．すると，データ $(x_i, y_i), i = 1, \cdots, N$, は，まず分布 $k(\xi)$ から ξ が一つ選ばれ（これを ξ_i とする），そのときパラメータ (u, ξ_i) の分布から (x_i, y_i) が発生すると考えてよい．こうすれば，すべてのデータ (x_i, y_i) は確率分布

$$p(x, y, u, k) = \int p(x, y, u, \xi) k(\xi) d\xi \tag{15.10}$$

からの N 個の独立なデータと考えることができる．ただしこのモデルは，未知パラメータは u の他に未知関数 $k(\xi)$ を含む．まさに局外母数が関数 k であり，その自由度が無限大となる場合である（図 15.3）．このような無限自由度の局外母数を含む統計モデルをセミパラメトリックモデルと呼ぶ[3)]．パラメータでは表せない母数を含むという意味である．これから，セミパラメトリックモデルに範囲を拡げて理論を展開する．

15.2 推定関数

パラメータの推定に，推定関数を用いる方法がある[*1)]．推定関数とは対数尤度の微分であるスコア関数を一般化したもので，これがセミパラメトリック問題に有効である．推定関数の定義から始めよう．いま，$f(x,u)$ という形の，確率変数 x と未知パラメータ u との関数を考える．x も u もベクトルで良いが，拡張は容易だからここではスカラーとして論を進める．比例の問題の場合は確率変数は (x,y) の組で 2 次元のベクトルであるが，一般論ではこれを単に x と書く（x はベクトルでもよかった）．

確率分布が (15.10) であるとして，関数 $f(x,u)$ の期待値を分布 $p(x,u,k)$ のもとで計算してみよう．真の値を u_0 とすると，どんな $k(\xi)$ を用いても，$p(x,u_0,k)$ のもとでの f 期待値が 0 になり，他の u では 0 にならないとする，

$$E_{p(x,u_0,k)}\left[f\left(x,u\right)\right]=0,\quad u=u_0\text{ のときだけ,} \tag{15.11}$$

このとき，$f(x,u)$ を不偏な推定関数と呼ぶ[5)]．

不変な推定関数が存在するとしよう．そうならばデータ D が与えられたとき，(15.10) で期待値を取る代わりにこれをデータによる算術平均で置き換えた，f の経験分布による期待値 $\sum f\left(x_i,u\right)/N$ は，N を大きくすれば真の期待値に収束する．したがってこれは $u=u_0$ のときに，このときに限って 0 になる．そこで，これを 0 と置いた

$$\frac{1}{N}\sum f\left(x_i,u\right)=0 \tag{15.12}$$

の解 $\hat{u}$ は良い推定値を与えるであろう．(15.12) を推定関数 f による推定方程式と呼ぶ．

通常の統計モデルのときは，スコア関数 $\dot{l}_u(x,u)=(d/du)l(x,u)$ は

$$\int p(x,u)\dot{l}_u(x,u)dx=0 \tag{15.13}$$

を満たすから，不偏な推定関数である（以後推定関数といえば不偏なものを指すことにする）．この場合は推定方程式は尤度方程式であり，この解が最尤推定

*1）あるとき，現代制御理論の父と呼ばれる Kalman 教授が私の部屋を突然訪問した．「今年のノーベル経済学賞は偏見に満ちた決定で納得できない」とまくし立てた後で，いまは，線形関係の推定の理論に力を注いでいる，うまい考えがあるという．私は，それは情報幾何で解決できると主張し，どちらの考えがよいか議論になった．私の回答がこれである．

量である．

推定関数は他にもあるだろう．とくに，局外母数 ξ または $k(\xi)$ を含む場合に，局外母数を含まない x と u との関数を考え，局外母数が何であっても (15.11) を満たすとしよう．このとき，推定方程式は局外母数を含まないから，ξ のことは考えずに推定方程式を解けば推定量 u が求まる．その解の性質を見ておく．

定理 15.1　推定関数による推定は漸近一致推定量を与え，その二乗誤差は漸近的に

$$E\left[(\hat{u}-u_0)^2\right]=\frac{1}{N}\frac{E\left[\{f(x,u_0)\}^2\right]}{\{E\left[f'(x,u_0)\right]\}^2} \tag{15.14}$$

である．ただし，f' は u による微分．

証明　これは通常の推定量の解析と同じ手法で証明できる．まず，推定方程式 (15.12) を真の値 u_0 の周りでテイラー展開して，

$$0=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum f(x_i,\hat{u}) \tag{15.15}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum f(x_i,u_0)+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum f'(x_i,u_0)(\hat{u}-u_0) \tag{15.16}$$

を得る．ここで，右辺の第 1 項は，中心極限定理から平均 0，分散

$$\sigma^2=E\left[\{f(x,u_0)\}^2\right] \tag{15.17}$$

のガウス分布 ε に近づく．一方，右辺の第 2 項は大数の法則から

$$\sqrt{N}E\left[f'(x,u)\right]=A \tag{15.18}$$

に収束する．ここで $A\neq 0$ とする．これより

$$\hat{u}-u_0=\frac{1}{\sqrt{N}}\frac{\varepsilon}{A} \tag{15.19}$$

となり，これは漸近一致推定量でその分散が (15.14) で与えられる．

セミパラメトリックモデルで，関数 $k(\xi)$ の一致推定量 $\hat{k}$ がデータから得られるとすれば，これを用いたスコア関数 $\dot{l}_u\left(x,u,\hat{k}\right)$ は，少なくとも漸近的には推定関数となる．もちろん，現実に関数 $k(\xi)$ の良い推定量を求めることは難しい．しかし，推定問題を論ずるのに，推定関数を用いる方法に絞ってもかまわないことをこれは示唆する．

そもそも推定関数が存在するかどうかは問題である．存在するとすればそれはどんなものか，それを全部を求めたい．さらに，多数ある場合はその中からどの推定関数を選べばよいかが問題である．そこで推定関数の情報幾何を論ずることにしよう．

15.3 推定関数の情報幾何

セミパラメトリックモデルのパラメータは u と関数 $k(\xi)$ である．その指定

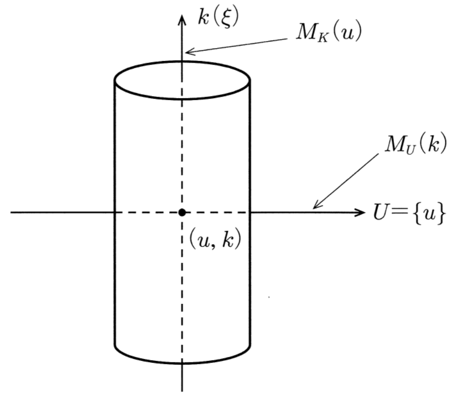


図 15.4　無限次元のセミパラメトリックモデル $S=\{p(x,u,k)\}$.

する確率分布の全体は，パラメータとして u と k からなる無限次元空間である（図 15.4）．無限次元空間を論ずるには周到な準備が必要であるが，ここではそれは無視して結果を重視する．厳密な理論づけは後から数学者が行えばよい．このくらい達観しないと新しい理論はできない．

k を固定すれば，統計モデルの多様体（この場合は座標系が u で 1 次元）

$$M_U(k)=\{p(x,u,k)\mid k:\text{固定}\} \tag{15.20}$$

が得られる．もし k が分かれば通常の統計的な手法で推定を行えばよい．

今度は u を固定して，k が自由に変わるパラメータだとしよう．すると，各 u に対して関数自由度の確率分布モデル

$$M_K(u)=\{p(x,u,k)\mid u:\text{固定}\} \tag{15.21}$$

が与えられる．ここで，各 u に関数自由度の確率モデル $M_K(u)$ が付いたものの全体は，$U=\{u\}$ を 1 次元の底空間とし，u の各点に関数空間 M_K をファイバーとして付けたファイバーバンドルと見なしてもよい（図 15.4）*2)．

S の点 (u,k) において接空間 $T_{u,k}$ を考える．接空間とは，確率分布 $p(x,u,k)$ の微小なずれ δp を集めたものと考えてよい．対数表現を用いれば，ずれは

$$\delta l(x,u,k)=\frac{\delta p(x,u,k)}{p(x,u,k)} \tag{15.22}$$

と書ける．このとき，

$$E\left[\delta l(x,u,k)\right]=0 \tag{15.23}$$

であるから，接空間 $T_{u,k}$ は確率変数 $r(x)$ で，次の条件

$$E\left[r(x)\right]=0 \tag{15.24}$$

を満たすものの全体として良い．ここで，2 つの接空間のベクトル $r(x), s(x)$

*2)　これをファイバーバンドルと見るには，各 u に対して $M_K(u)$ 間の同型対応が必要である．ここではそれを論じないので，単に u 軸の各点にファイバー M_K が付いた構造と考えてもらいたい．

に対して内積

$$(r, s) = E\left[r(x)s(x)\right] \tag{15.25}$$

の存在を仮定する．すると，$T_{u,k}$ はヒルベルト空間である．推定関数 $f(x, u)$ は (15.24) を満たすから，どの k においても接空間 $T_{u,k}$ に属するベクトルである．

u 軸に沿った接ベクトル

$$\frac{d}{du} l(x, u, k) = \dot{l}_u(x, u, k) \tag{15.26}$$

は接空間 $T_{u,k}$ の 1 次元の部分空間である．これを

$$T_U(u, k) = \left\{\dot{l}_u(x, u, k)\right\} \tag{15.27}$$

とおく．一方，k 方向に沿った接ベクトルを考えると，関数 $k(\xi)$ は無限次元の拡がりを持つから k を変えたときの対数尤度の微分は Fréchet 微分となる．もっと簡単に，k の空間で曲線 $k(\xi, t)$ を考え，t による微分

$$\dot{l}_k(x, u, t) = \frac{d}{dt} \log p\left\{x, u, k(\xi, t)\right\} \tag{15.28}$$

の張る空間を考えてもよい．これは $\{k(\xi)\}$ からなる関数空間に曲線 $k(\xi, t)$ を考えたとき，その接線方向 $\dot{k}(\xi, t)$ への微分である．このような曲線は無限にあるから，それらの張る空間は無限次元である．この接空間を局外母数接空間と呼び $T_K(u, k)$ と書こう．

この 2 つは u の変化および k の変化に伴う確率分布の変化を示す接ベクトルである．しかしこれ以外にも，$E[a(x)] = 0$ を満たす接ベクトルはある．そこで，接空間を直和に分解し

$$T = T_U \oplus T_K \oplus T_A \tag{15.29}$$

と書く（図 15.5)．このとき，T_A は，$T_U \oplus T_K$ に直交するものとする．これを補助接空間と呼ぶ．T_A のベクトルは，u や k を変えたのでは得られない，これらに直交する確率分布の変化である．

接ベクトルの平行移動を考えよう．接ベクトル $r(x)$ を確率分布空間で分布 $p(x)$ から $q(x)$ へ平行移動する．これには e 平行移動と m 平行移動がある．分布空間 $S = \{p(x)\}$ の e アファイン座標系は $l(x) = \log p(x)$ であるから，ε を微小な数として l の微小変化 $\delta l = \varepsilon r(x)$ を表す接ベクトルはそのまま平行に移動できると考えてよい．したがって，対数尤度の変化分で表した接ベクトル $r(x)$ の e 平行移動は，そのまま

$$\overset{e}{\prod}{}_p^q r(x) = r(x) \tag{15.30}$$

として良さそうであるが，p 点での接ベクトル $r(x)$ は $E_p[r(x)] = 0$ を満たすが，それはこのままでは q 点で $E_q[r(x)] = 0$ を満たすとは限らない．したがってこの分の定数を差し引いて

$$\overset{e}{\prod}{}_p^q r(x) = r(x) - E_q[r(x)] \tag{15.31}$$

を r の e 平行移動とする．

S での m アファイン座標系は $p(x)$ であるから，p の微小変化分 $\delta p(x)$ の m 平行移動は，$\delta p(x)$ をそのまま移せばよいが，接ベクトル $r(x)$ は対数の微分（スコア）で表現しているから，これに対応するものは

$$\delta l(x) = \frac{\delta p(x)}{p(x)} \tag{15.32}$$

である．しかし q 点ではこれは $\delta p(x)/q(x)$ と表現される．したがって，$r(x)$ の m 平行移動を

$$\overset{m}{\prod}{}_p^q r(x) = \frac{p(x)}{q(x)} r(x) \tag{15.33}$$

で定義すればよい．これは

$$E_q\left[\overset{m}{\prod}{}_p^q r(x)\right] = 0 \tag{15.34}$$

を満たす．

定理 15.2　2 つの平行移動は，次の条件を満たし双対である．

$$\langle a(x), b(x)\rangle_p = \left\langle \overset{e}{\prod}{}_p^q a(x), \overset{m}{\prod}{}_p^q b(x) \right\rangle_q . \tag{15.35}$$

u を固定し，$M_K(u)$ 上で k 点での接ベクトル $r(x)$ を k' 点へ平行移動しよう．2 つの平行移動を

$$\overset{e}{\prod}{}_k^{k'} r(x), \quad \overset{m}{\prod}{}_k^{k'} r(x) \tag{15.36}$$

のように書く（図 15.6）．

推定関数 $f(x, u)$ は任意の k について (15.24) を満たす．これより，推定関

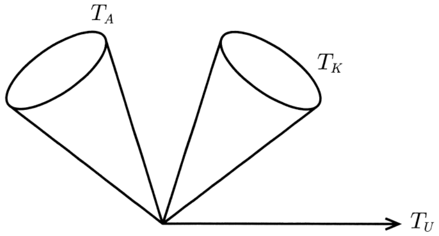


図 15.5　接空間 $T_{u,k}$ の分解．

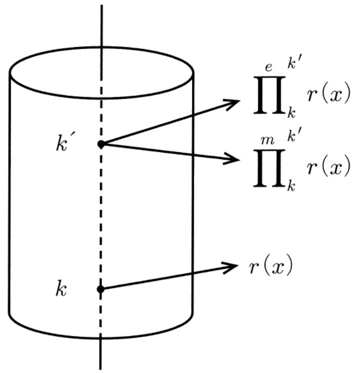


図 15.6　接ベクトル $r(x)$ の k 点から k' 点への平行移動．

数の特徴づけができる.

定理 15.3 推定関数は e 平行移動で不変,

$$\prod_{k}^{e\ k'} f(x,u) = f(x,u) \tag{15.37}$$

となる接ベクトルである.

さらに, k として曲線 $k(\xi,t)$ を考えて, (15.11) を t で微分すると,

$$\int \dot{p}(x,u,k(t))f(x,u)dx = E\left[\dot{l}f(x,u)\right] = 0. \tag{15.38}$$

すなわち, 任意の k 点において, T_K に属する接ベクトル $\dot{l}$ をとれば, これは推定関数 f と直交する. k の曲線に沿った変化の接ベクトルを

$$v(x,u,k) = \dot{l}\left\{x,u,k(t)\right\}, \tag{15.39}$$

とすれば, 任意の v に対して $\langle v, f(x,u)\rangle = 0$ が成立する. すなわち, 推定関数 $f(x,u)$ は T_K に直交する. ここで, $v(x,u,k)$ を k から k' に m 平行移動し, f を同じく e 平行移動する. f はこの平行移動で変わらないから f のままである. そこで (15.35) を使えば, 両者の内積は変わらないから

$$\left\langle \prod_{k}^{m\ k'} v(x,u,k), f(x,u) \right\rangle_{k'} = 0. \tag{15.40}$$

この式を (u,k) 点に戻って考えることにし, 任意の k' における $k(\xi)$ 方向の接ベクトル $v\,(x,u,k')$ を k 点に m 平行移動し, こうして得られるベクトルをすべて集めたベクトル空間を

$$F_K = \bigcup_{k'} \prod_{k'}^{m\ k} T_K\,(k') \tag{15.41}$$

と置く.

定理 15.4 推定関数 $f(x,u)$ は F_K と直交する e 平行移動不変な接ベクトルである.

さらに, (15.11) を u で微分する. $\log p(x,u,k)$ を u で微分した $\dot{l}(x,u,k)$ を用いると,

$$E\left[f'(x,u)\right] + \langle \dot{l}(x,u,k), f(x,u)\rangle = 0, \tag{15.42}$$

ここで $E\left[f'(x,u)\right] \neq 0$ だから, f は T_U 方向の成分 $\dot{l}$ を含まなければならないことが分かる.

以上で推定関数の特性がわかった. ここで, スコア関数 $\dot{l}$ を F_K に直交するように, F_K の直交補空間に射影したものを $\dot{l}_I(x,u,k)$ と書き, これを情報スコアと呼ぶ.

定理 15.5　推定関数は情報スコア $\dot{l}_I$ が 0 でないとき，このときに限り存在する．すべての推定関数は，$a(x)$ を補助接空間 T_A に属するベクトルとして，どの k 点でも

$$f(x,u) = \dot{l}_I(x,u,k) + a(x) \tag{15.43}$$

の形に分解でき，この形のものに限る．

これで推定関数がどんなものか分かった．k を勝手に選んでこれを固定した

$$f(x,u) = \dot{l}_I(x,u,k) \tag{15.44}$$

はどれも推定関数である．k は何でもよく，真の k と違った k を用いても，推定関数が得られる．もちろん真の k を知っていれば，それが良い．

定理 15.6　真の分布が $p(x,u,k)$ であるとき，最良の推定関数は $\dot{l}_I(x,u,k)$ であり，このときの推定量の平均二乗誤差は

$$E\left(\hat{u}-u\right)^2 = \frac{1}{N}\frac{E\left[\dot{l}_I^2\right]}{\left\{E\left[\dot{l}_I\right]\right\}^2} \tag{15.45}$$

で与えられる．

もちろん，真の k は未知であるから，この推定関数はこのままでは使えない．しかし，良い推定関数を作る指針として，これが使える．

例えば，良くある単純化として，未知関数 $k(\xi)$ を有限個パラメータ $\boldsymbol{v}$ を含んだ $k(\xi,\boldsymbol{v})$ の形で仮定する．すると，統計モデルは有限次元のパラメータ $(u,\boldsymbol{v})$ を用いた分布族で，$p\left\{x,u,k(\xi,\boldsymbol{v})\right\}$ の形になる．そこで u と $\boldsymbol{v}$ を最尤推定すれば，推定量 $(\hat{u},\hat{\boldsymbol{v}})$ が得られる．しかし，真の k は $k(\xi,\boldsymbol{v})$ の形には書けないから，$\hat{u}$ はこのままではバイアスがあり，一致性も保証されず使い物にならない．ただ，真の k の近似である $\hat{k}=k\left(\xi,\hat{\boldsymbol{v}}\right)$ を用いて，$\dot{l}_I\left\{x,u,k\left(\xi,\hat{\boldsymbol{v}}\right)\right\}$ を推定関数に使って改めて u の推定を行う．このとき，得られる推定量 $\hat{u}$ は一致性を持ち，その平均二乗誤差は $\hat{k}$ がそれなりに良ければ，良い推定量を与える．これは $p\{x,u,k(\xi,\boldsymbol{v})\}$ というモデルを仮定して直接に得た推定量 $\hat{u}$ とは全く違う．情報スコア関数を用いているからである．

終わりの一言

今回はセミパラメトリックモデルにおいて，推定関数の一般論を構成し，これが幾何学にうまく合うことを見た．この中で，Neyman–Scott 問題は m 平坦の構造を持つので，容易に解ける．次回はいよいよ比例の問題を解いてみよう．なお，文献は紙数の関係で次回にまとめて記す．

（あまり・しゅんいち，理化学研究所脳科学総合研究センター）

特　集（2012 年 8 月号予告）

導来圏をめぐって

数学と物理の新たな世界に迫る

本体 952 円

特　集（2012 年 6 月号）

面白い発想［物理編］

物理的思考のためのヒントを探る

本体 952 円

編集後記

皆さんも身の周りを探してみると，格子，あるいは格子状のものがあるかと思います．記事中では美しい図を交えて解説していただいているものもあります．また，身近な結晶であれば，雪や塩が想像されます．こうした結晶の形状を想像しながら，お読みいただければ幸いです．

また，記事の中では離散的に現象・物事を見て，そこから格子へつなげていくものもあります．連続的に現象・物事を見て，行き詰まってしまったら，たまにはこうしたものの見方をすると新しい発想が生まれるかもしれません．　(R)

＊　　＊

“格子” というワードから私が連想できたものは結晶程度でしたが，今回の特集ではそれ以外にも様々な数学と物理の格子の発想が取り上げられています．また，藤原先生の記事では数学と物理での格子の説明の違いに触れていますが，考え方の違いが面白いなと感じました．

私は現象の説明においては連続的にとらえることが理想であるのかと思っていましたが，離散的なものの見方も重要であり様々な形で利用されているようです．今回の特集ではそういったことも勉強になりました．　(T)

数　理　科　学　7月号

2012 年 7 月 1 日発行

数 理 科 学 編 集 部　　　発行人 木　下　敏　孝
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所 ⓒ 株式会社 サ イ エ ン ス 社　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒 151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁